



Fluctuations de courant hors d'équilibre

Antoine Gerschenfeld

► To cite this version:

Antoine Gerschenfeld. Fluctuations de courant hors d'équilibre. Mécanique statistique [cond-mat.stat-mech]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2012. Français. NNT : . tel-00660285

HAL Id: tel-00660285

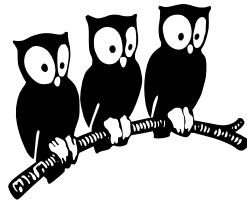
<https://theses.hal.science/tel-00660285>

Submitted on 16 Jan 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
Département de Physique
Laboratoire de Physique Statistique



THÈSE DE DOCTORAT DE
L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE (PARIS VI)
Spécialité : Physique Statistique

présentée par

Antoine GERSCHENFELD

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)

Fluctuations de courant hors d'équilibre

Soutenue le devant le jury composé de :

M. Henk VAN BEIJEREN	Rapporteur
M. Bernard DERRIDA	Directeur
M. Victor DOTSENKO	Examineur
M. Guy FAYOLLE	Rapporteur
M. Roberto LIVI	Examineur
M. David MUKAMEL	Examineur

Remerciements

Ce manuscrit est l'aboutissement de presque quatre années de travaux (2008-2012) au Laboratoire de Physique Statistique de l'École Normale Supérieure. Celui-ci se situe au coeur d'une concentration inégalée (à ma connaissance) de chercheurs en mathématiques et en physique ; il m'a également permis de profiter de la tenue à Paris d'un grand nombre de conférences et de colloques tout au long de ma thèse. Je tiens à remercier son directeur, Éric PEREZ, pour son accueil.

L'ensemble des résultats présentés ci-après est le fruit de riches et nombreuses discussions avec Bernard DERRIDA, mon directeur de thèse, que je tiens à remercier chaleureusement ici. De l'Ansatz de Bethe et à l'hydrodynamique fluctuante, il m'a initié à l'étonnant monde des systèmes hors d'équilibre ; j'ai également appris à ses côtés l'art difficile de la rédaction des articles et des présentations de conférence, ainsi que ce que je qualifierais d'«une certaine idée de la science». Ses enseignements m'accompagneront, je l'espère, tout au long de ma vie professionnelle.

Je tiens à remercier Éric BRUNET pour l'aide cruciale qu'il nous a apportée dans l'étude numériques des étranges 'systèmes anormaux' de la partie II, ainsi que Joel LEBOWITZ pour les longues discussions que nous avons pu avoir à leur sujet et, bien sûr, pour avoir porté à notre connaissance cet étrange modèle d'Ianaro-Lebowitz. Je remercie également Herbert SPOHN et Tomohiro SASAMOTO pour leurs discussions de l'Ansatz de Bethe sur la ligne infinie, ainsi que Stefano LEPRI, Roberto LIVI et Henk VAN BEIJEREN pour les réflexions et explications qu'ils nous ont apportées sur la théorie des systèmes anormaux.

Je voudrais aussi remercier Victor DOTSENKO, Roberto LIVI et David MUKAMEL pour avoir accepté de participer à mon jury de thèse, ainsi que, plus particulièrement, mes rapporteurs, Guy FAYOLLE et Henk VAN BEIJEREN, pour l'attention très appréciée qu'ils ont portée à mon manuscrit : leurs remarques et commentaires ont apporté un éclairage nouveau à plusieurs des points discutés dans ce manuscrit, et ont joué un rôle décisif pour donner sa forme finale au texte que vous tenez entre vos mains.

J'ai eu le bonheur de trouver au LPS un environnement convivial et accueillant dans lequel mener mes recherches. Je souhaiterais remercier ses secrétaires, Marie GEFFLOT, Nora SADAoui et Annie RIBAUDEAU, pour m'avoir guidé le long du (tortueux) chemin des ordres de mission, avances et autres remboursements ; Xavier LEYRONAS, François PÉTRÉLIS, Moktar ADDA-BEDIA, Gérard WEISBUCH, et Vincent HAKIM, co-utilisateurs

de notre petite cafétéria du 2^e étage ; et Sébastien BALIBAR pour ses questions indispensables, aux séminaires comme sur les travaux !

J'aimerais aussi remercier mes compagnons le long de la route de la thèse, à commencer par Damien, mon 'prédécesseur' avec Bernard, dont les conseils avisés ont joué un rôle crucial à mes débuts ; Hervé, Sébastien, Laëtitia 'G', Miguel, Giorgio et Nestor, mes 'aînés' dans la Dc21 ; et mes 'cadets', Marc (dont les 50 dosettes de café ont sans doute joué une part prépondérante dans la rédaction de ce manuscrit) et Laëtitia 'P', la transfuge au LPT.

Enfin, je souhaiterais remercier ma famille, qui m'a inspiré et soutenu tout au long de ma thèse, jusqu'à écouter avec attention mes explications ! Cuca et Serge, Gaspard, et, bien sûr, mon père et ma mère, Abel et Catherine.

Table des matières

Remerciements	ii
Table des matières	iv
Introduction	vii
I Courant d'un système diffusif sur une ligne infinie	1
1 Modèles de gaz sur réseau	5
2 Approches théoriques hors d'équilibre	7
2.1 Ansatz de Bethe pour le SSEP	7
2.2 Théorie macroscopique des fluctuations	8
3 Résultats connus sur les fluctuations de courant	13
3.1 Système ouvert : état stationnaire hors d'équilibre	13
3.2 Géométrie périodique : autour de l'équilibre	15
3.3 Exclusion asymétrique sur la ligne infinie	17
3.4 Courant dans les systèmes quantiques	18
4 Conditions initiales : cas recuit et gelé	21
5 Calcul microscopique des fluctuations de courant du SSEP	23
5.1 Invariance de la fonction génératrice	23
5.2 Fonctions de Bethe des probabilités de transition	26
5.2.1 Expression déterminantale exacte	26
5.2.2 Comportement asymptotique	28
5.3 Des fluctuations nettement non-gaussiennes	30
6 Systèmes diffusifs : résultats de l'approche macroscopique	33
6.1 Calcul variationnel de la fonction génératrice	33
6.2 Renversement du temps et théorème des fluctuations	35
6.3 Équations d'optimisation de l'action	37

6.3.1	Transformation de Martin-Siggia-Rose	37
6.3.2	Résolution exacte en l'absence d'interactions	39
6.4	Une généralisation de l'invariance de la fonction génératrice	41
6.5	Encadrement de la décroissance non-gaussienne des fluctuations	45
7	Perspectives	47
II	Conduction et corrélations anormales dans les systèmes mécaniques 1D	49
8	Quelques modèles mécaniques 1D	53
8.1	Le modèle de Fermi-Pasta-Ulam	53
8.2	Gaz de particules élastiques	54
8.2.1	Gaz de bâtons durs	54
8.2.2	Disques durs sur tore fin	56
8.3	Le modèle d'Ianiro-Lebowitz	57
9	Résultats connus sur la conduction	59
9.1	Observations numériques d'une loi de Fourier anormale	59
9.1.1	Gaz de bâtons durs bipartite	59
9.1.2	Modèles de Fermi-Pasta-Ulam FPU- α et FPU- β	60
9.2	Des prédictions théoriques parfois contradictoires	61
9.2.1	Analyse dimensionnelle de l'équation de Navier-Stokes	61
9.2.2	Autres approches	63
9.3	Anomalie dans des modèles exactement solubles	64
9.4	Équation de Boltzmann du modèle d'Ianiro-Lebowitz	65
10	Anomalie des cumulants supérieurs du courant	67
10.1	Méthode de mesure des cumulants du courant	67
10.2	Simulations numériques du gaz de bâtons durs et du modèle I-L en géométrie ouverte	69
10.3	Simulations en géométrie périodique et dépendance de l'anomalie en les conditions au bord	71
10.4	Comportement des cumulants à des temps intermédiaires	72
10.4.1	Comportement à temps court et système infini	72
10.4.2	Oscillations de $\langle Q_t^2 \rangle_c$ et ondes sonores	73
11	Corrélations anormales des champs de vitesse et d'énergie	75
11.1	Violation de l'équation de Boltzmann par le modèle d'Ianiro-Lebowitz	75
11.2	Croissance de corrélations à une échelle mésoscopique	76
12	Perspectives	81

III Fluctuations de courant anormales dans le modèle ABC	83
13 Résultats connus sur le modèle ABC	87
13.1 Énergie libre et transition de phase	87
13.2 Équations hydrodynamiques	89
13.3 Diagramme de phase	90
14 Régime critique en géométrie périodique	93
14.1 Hydrodynamique déterministe au point critique	93
14.2 Hydrodynamique fluctuante et échelle de temps lente	95
15 Corrélations anormales au point critique	97
15.1 Anomalie des corrélations spatiales	97
15.2 Corrélations temporelles	99
15.2.1 Décroissance en loi de puissance	99
15.2.2 Décroissance à l'échelle de temps lente	101
16 Fluctuations de courant au point critique	105
16.1 Forme d'échelle des cumulants du courant	105
16.2 Le cas des densités égales	107
17 Fluctuations de courant hors du régime critique	109
17.1 Cumulants du courant dans la phase plate	110
17.2 Calculs numériques dans la phase modulée	114
17.3 Simulations des premier et deuxième cumulants	116
18 Corrélations et courant en régime tricritique	119
18.1 Hydrodynamique fluctuante tricritique	120
18.2 Anomalie du courant	122
18.3 Comportement des fonctions de corrélation	123
19 Perspectives	125
Conclusion	127
Bibliographie	128
Résumé	137

Introduction

L'objet de cette thèse est l'étude des fluctuations de courant dans des systèmes de physique statistique hors d'équilibre. La physique statistique se donne pour but de décrire les propriétés d'ensemble (*macroscopiques*) de systèmes composés d'un grand nombre de constituants élémentaires (dits *microscopiques*). Aujourd'hui, les caractéristiques de ces constituants sont souvent connues avec précision. Historiquement, cela n'a pas toujours été le cas : par exemple, lors de la publication des travaux de Boltzmann dans les années 1870, l'existence même des atomes faisait débat. Il s'est donc avéré important que la nouvelle théorie soit *robuste*, c'est-à-dire que ses prédictions dépendent aussi peu que possible des détails microscopiques des systèmes étudiés.

La physique statistique traite donc, par construction, d'objets dont nous n'avons qu'une connaissance lacunaire : nous pouvons mesurer la température d'un gaz, mais pas la vitesse de chacune de ses particules. Il est donc nécessaire d'adopter, pour décrire cette information partielle, une démarche probabiliste, responsable du qualificatif de physique *statistique* : de fait, les nombreux domaines considérés aujourd'hui comme relevant de la physique statistique ont pour principal point commun leur utilisation de la théorie des probabilités.

Le premier de ces domaines est sans aucun doute la théorie cinétique des gaz, issue des travaux de (entres autres) Bernoulli (1738), Clausius (1857), Maxwell (1859) et Boltzmann (1871). Ce point de départ s'est ensuite élargi pour recouvrir des systèmes dont la dynamique est intrinsèquement aléatoire (le mouvement brownien, décrit par Einstein en 1905), puis des systèmes dont la dynamique est quantique (présentant donc un caractère aléatoire intrinsèque à travers le postulat de la mesure).

Considérons donc un système microscopique décrit de manière probabiliste. Si ce système n'a pas de mémoire (son évolution à des temps $t > t_0$ ne dépend de son histoire, $t \leq t_0$, qu'à travers son état à $t = t_0$), alors il peut être décrit, en termes mathématiques, par une chaîne de Markov : sa dynamique est entièrement décrite par la probabilité $W(\mathcal{C} \xrightarrow{t} \mathcal{C}')$ que, partant de la configuration microscopique \mathcal{C} , il se retrouve dans la configuration \mathcal{C}' après un temps t .

La physique statistique la plus développée est dite d'*équilibre*. Elle se limite à des systèmes *réversibles*, c'est à dire dont le comportement est inchangé sous l'effet d'un renversement du sens du temps : qualitativement, une bombonne de gaz fermée est réversible, mais une bombonne ouverte (dont le gaz s'échappe) ne l'est pas. En termes

de la probabilité $W(\mathcal{C} \xrightarrow{t} \mathcal{C}')$, cette propriété se traduit par la relation suivante, dite de bilan détaillé :

$$\mathbb{P}_{\text{eq.}}(\mathcal{C})W(\mathcal{C} \xrightarrow{t} \mathcal{C}') = \mathbb{P}_{\text{eq.}}(\mathcal{C}')W(\mathcal{C}' \xrightarrow{t} \mathcal{C}) \quad (1)$$

La fonction $\mathbb{P}_{\text{eq.}}(\mathcal{C})$ est une loi de probabilité : on peut montrer que, pour des temps suffisamment longs, la distribution de probabilité des états du système tendra à rejoindre cette loi, dite d'équilibre. Les propriétés auxquelles s'intéresse la physique statistique d'équilibre ne dépendent que de cette loi : ainsi, elles restent les mêmes pour tous les choix de dynamique $W(\mathcal{C} \xrightarrow{t} \mathcal{C}')$ qui aboutissent à la même distribution $\mathbb{P}_{\text{eq.}}(\mathcal{C})$.

La condition de bilan détaillé (1) est une condition suffisante, mais pas nécessaire, pour que le système microscopique tende vers une distribution indépendante du temps. Une telle distribution, qualifiée de "stationnaire", doit vérifier une relation de bilan *global*, plus faible, qui prend la forme

$$\mathbb{P}_{\text{stat.}}(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} \mathbb{P}_{\text{stat.}}(\mathcal{C}')W(\mathcal{C}' \xrightarrow{t} \mathcal{C}). \quad (2)$$

Les systèmes satisfaisant le bilan global tout en brisant le bilan détaillé sont qualifiés de *stationnaires hors d'équilibre* : c'est le cas des systèmes qui tendent vers un état indépendant du temps dans lequel persiste un courant, d'énergie ou de particules (par exemple une baignoire qui se vide et se remplit avec le même débit). Enfin, il est possible d'étudier les propriétés de systèmes n'ayant pas encore atteint leur éventuel état stationnaire : ces situations sont qualifiées de *transientes*.

L'étude de ces deux catégories de systèmes (stationnaires et transients) est l'objet de la mécanique statistique hors d'équilibre. Celle-ci présente, par rapport à son homologue d'équilibre, plusieurs difficultés supplémentaires. D'une part, la détermination d'une loi stationnaire $\mathbb{P}_{\text{stat.}}(\mathcal{C})$ (2) est souvent bien plus complexe que celle d'une loi $\mathbb{P}_{\text{eq.}}(\mathcal{C})$ vérifiant le bilan détaillé (1) ; de plus, plusieurs propriétés des systèmes hors d'équilibre (qualifiées de *dynamiques*) dépendent des détails de la dynamique microscopique $W(\mathcal{C} \xrightarrow{t} \mathcal{C}')$.

En contrepartie, la physique statistique hors d'équilibre a permis d'obtenir plusieurs résultats importants, qui ont souvent permis d'améliorer notre compréhension générale du domaine. On peut citer par exemple le théorème des fluctuations de Galavotti-Cohen [25, 40, 41, 48, 49, 58, 83] ou encore l'égalité de Jarzynski [64] : cette dernière permet de raffiner et de justifier le second principe de la thermodynamique. Celui-ci postule que 'l'entropie d'un système isolé ne peut qu'augmenter', c'est à dire qu'il est impossible d'en extraire du travail au niveau macroscopique :

$$\langle W \rangle \geq 0,$$

où W est le travail (aléatoire) extérieur fourni au système. Jarzynski a pu établir l'égalité

$$\langle e^{-W/k_B T} \rangle = 1,$$

dont le second principe découle (par l'inégalité de Jensen), et qui fournit une information plus riche que celui-ci.

Il est également nécessaire de recourir à la théorie hors d'équilibre pour résoudre certaines questions posées à la physique statistique. L'une de ces questions, qui joue un rôle central dans cette thèse, est celle de la loi de Fourier, qui postule (phénoménologiquement) que, dans un système macroscopique continu à une température $T(x)$ variable, il se crée un flux de chaleur $Q(x)$, proportionnel au gradient de température $\nabla T(x)$, qui tend à homogénéiser les variations de température :

$$Q(x) = -\kappa \nabla T(x). \quad (3)$$

D'un point de vue théorique, on peut se demander sous quelles hypothèses un système microscopique donnera lieu, au niveau macroscopique, à un courant satisfaisant (3). À l'heure actuelle, ce problème reste un sujet très actif, en particulier pour des systèmes unidimensionnels [20] : de plus, l'analyse numérique [22, 36, 38, 54, 77] a montré que toute une classe de systèmes (qui font l'objet de la partie II) ne satisfont pas à cette loi [5, 35, 37, 74, 76, 79, 84]. Enfin, la loi de Fourier ne porte que sur la valeur moyenne $Q(x)$ d'un courant d'énergie par nature aléatoire : il peut donc s'avérer intéressant d'étudier les fluctuations de ce courant [17, 52, 56, 57, 60].

Le déroulement de ma thèse a pris la forme de trois "phases" d'à peu près une année chacune. Dans la première, nous nous sommes intéressés à une classe de systèmes, dits diffusifs, pour lesquels une théorie macroscopique existe (section 2.2), et dont les fluctuations de courant dans des états stationnaires sont bien comprises (chapitre 3). Nous avons étudié les fluctuations de courant de ces systèmes dans une situation transiente (ne présentant pas d'état stationnaire).

Dans un second temps, notre attention s'est portée sur les systèmes unidimensionnels ne vérifiant pas la loi de Fourier : pour ces systèmes, les approches théoriques existantes (section 9.2) ne permettent pas de prédire le comportement des fluctuations de courant au-delà du premier cumulant. Nous avons mesuré celles-ci numériquement, pour des systèmes, dits *mécaniques*, dont la violation de la loi de Fourier est connue : nous avons cherché à déterminer l'effet de cette violation sur les cumulants supérieurs du courant, ainsi que le comportement des fonctions de corrélations dans ces systèmes.

Enfin, nous avons considéré un système, le modèle *ABC* [43, 44], présentant des points communs avec les deux types de systèmes, diffusifs et mécaniques, que nous avons étudiés. Tout comme les systèmes diffusifs, ce modèle peut être abordé par une approche macroscopique : de plus, il a pour particularité de présenter une transition de phase, hors d'équilibre, entre un état totalement désordonné et un état modulé [3, 4, 23, 70, 71]. Nous nous sommes intéressés à l'effet de cette transition de phase sur les fluctuations de courant du système, ainsi qu'au comportement des fonctions de corrélation [19] au niveau du point critique.

Ce mémoire est organisé en trois parties, relativement indépendantes, qui présentent les trois axes de mon travail de thèse : les fluctuations de courant d'un système diffusif sur une ligne infinie (chapitres 1 à 7), le comportement anormal du courant et des fonctions de corrélation dans les modèles mécaniques (chapitres 8 à 12), et enfin les fluctuations de courant dans le modèle *ABC* (chapitres 13 à 19).

La partie I débute par une introduction aux systèmes diffusifs unidimensionnels, dont les modèles microscopiques les plus courants sont les gaz sur réseau (chapitre 1).

Ces systèmes peuvent être traités directement à partir de leur dynamique microscopique (section 2.1) ; ils peuvent également être abordés à l'aide d'une théorie macroscopique hors d'équilibre, la théorie macroscopique des fluctuations (section 2.2). Cette dernière approche a permis de calculer les fluctuations de courant dans plusieurs cas : ces résultats connus sont rappelés dans le chapitre 3. L'approche microscopique a, quant à elle, déjà été utilisée pour étudier des systèmes non diffusifs sur la ligne infinie (section 3.3).

C'est à ce dernier cas que nous nous sommes intéressés : il revient à étudier les fluctuations de courant dans un état transien. Dans ce type d'état, le choix de la condition initiale a un effet important sur la mesure du courant : le chapitre 4 présente les deux mesures de courant que l'on peut définir. Le chapitre 5 expose les résultats que nous avons obtenus par l'approche microscopique. Une invariance surprenante de la fonction génératrice du courant (section 5.1) permet de la calculer exactement, sous une forme particulièrement simple. Nous pouvons l'exprimer à temps long de manière analytique (section 5.2) : les distributions de courant correspondantes ont pour particularité de décroître très rapidement (section 5.3).

Le chapitre 6 est quant à lui consacré aux résultats que nous a fournis l'approche macroscopique. Nous avons tout d'abord étudié les symétries présentées par cette théorie. L'une, par renversement du temps, nous a permis d'énoncer un théorème des fluctuations pour ce système transien (section 6.2) ; l'autre, qui correspond à une invariance par rotation, est une généralisation de la dépendance en un paramètre, connue pour d'autres géométries, que nous avons constatée au niveau microscopique (section 6.4). La théorie elle-même ne peut être résolue exactement que dans un cas très simple (section 6.3.2) : cela nous a néanmoins permis de généraliser la décroissance rapide de la distribution des fluctuations de courant à d'autres systèmes (section 6.5).

La partie II présente les travaux que nous avons effectués sur les systèmes mécaniques 1D. Ces modèles, qui ne vérifient pas la loi de Fourier, sont introduits dans le chapitre 8 : le chapitre 9 expose brièvement les résultats connus à leur sujet. Nous montrons ensuite, dans le chapitre 10, que cette loi de Fourier anormale se généralise aux quatre premiers cumulants du courant (section 10.2). L'étude des cumulants permet également d'étudier ces systèmes en géométrie périodique : la décroissance anormale des cumulants est alors modifiée (section 10.3).

Dans le cas du modèle d'Ianiri-Lebowitz, pour lequel l'équation de Boltzmann prédit que la loi de Fourier est vérifiée, ces résultats sont étonnants. Pour étudier plus en détail les causes de cet écart à l'équation de Boltzmann, nous avons mesuré, dans le chapitre 11, les fonctions de corrélation de l'état stationnaire de ces systèmes mécaniques : il apparaît que celles-ci décroissent également de manière anormale. De plus, cette décroissance semble avoir lieu sur une échelle spatiale intermédiaire entre échelles microscopique et macroscopique.

Enfin, la partie III est consacrée à notre étude du modèle *ABC*. Le chapitre 13 rappelle les résultats connus (théorie macroscopique, transitions de phase) sur ce modèle ; puis, dans le chapitre 14, nous montrons comment cette théorie peut être adaptée pour décrire son comportement au voisinage de la transition. Dans les chapitres 15 et 16, nous utilisons cette théorie effective pour prédire comment les fonctions de corrélation et les cumulants du courant de particules se comportent au point critique : nous aboutissons

à une loi de Fourier anormale qui rappelle celles que nous avons observées dans les systèmes mécaniques.

Pour confirmer ces résultats, nous avons calculé, dans le chapitre 17, le comportement asymptotique des cumulants du courant loin du point critique : nous pouvons ainsi vérifier qu'il se raccorde bien avec nos prédictions à la transition. Enfin, dans le chapitre 18, nous étudions un cas particulier où la transition de phase devient tricritique : dans ce régime, les comportements anormaux des cumulants et des corrélations sont modifiés.

Première partie

Courant d'un système diffusif sur une ligne infinie

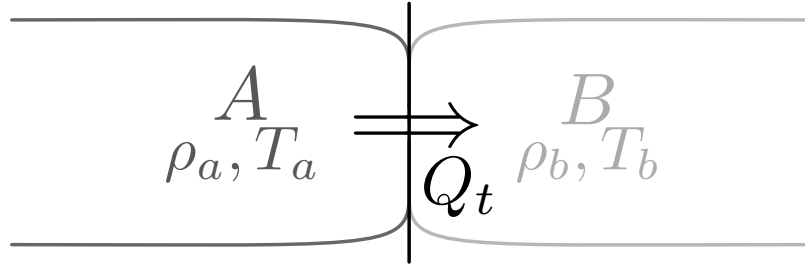


FIGURE 1 – Transfert de courant transient entre deux réservoirs sur la ligne infinie. Deux réservoirs 1D semi-infinis, d'énergie ou de particules à des températures ou à des densités différentes, sont mis en contact à l'instant initial : nous cherchons à calculer les fluctuations du courant d'énergie ou de particules Q_t entre les deux réservoirs pendant l'intervalle de temps $[0, t]$.

Dans cette première partie, nous nous intéressons à la situation ci-dessus : comment se comporte le flux de chaleur Q_t entre deux réservoirs unidimensionnels, semi-infinis, mis en contact à l'instant 0 ?

Cette situation est non seulement hors d'équilibre mais également transiente à tout temps : il subsiste à tout temps, dans le système, un gradient (de plus en plus faible) depuis (ρ_a, T_a) jusqu'à (ρ_b, T_b) .

Une telle géométrie a été considérée antérieurement dans la littérature, pour étudier des systèmes présentant des fronts tels que l'exclusion asymétrique ou l'équation KPZ [65, 66, 91, 92, 100, 101]. Nous étudions ici exclusivement des systèmes diffusifs, tels ceux présentés dans le chapitre 1 : pour ces systèmes, nous avons étudié la distribution du courant Q_t .

Dans un premier temps, nous avons calculé la fonction de grandes déviations de Q_t par une approche microscopique dans le cas particulier de l'exclusion symétrique. À partir de résultats récents obtenus par Tracy et Widom [100, 101] par Ansatz de Bethe [2, 27, 28, 34, 53, 55, 89] pour ce modèle, nous avons abouti à une expression exacte de la fonction génératrice de Q_t , $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$. De manière surprenante, celle-ci ne dépend des densités ρ_a et ρ_b des réservoirs qu'à travers un seul paramètre $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)$:

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} \underset{t \rightarrow \infty}{\simeq} \sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{n \geq 1} \frac{(-1)^{n+1}}{n^{3/2}} \omega^n. \quad (4)$$

La dépendance en ω avait déjà été observée pour d'autres géométries [17] :

$$\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b) = \rho_a(e^\lambda - 1) + \rho_b(e^{-\lambda} - 1) + \rho_a \rho_b (e^\lambda - 1)(e^{-\lambda} - 1). \quad (5)$$

la distribution de Q_t correspondante présente une décroissance fortement non-gaussienne,

$$\text{Pro}[Q_t \simeq q] \underset{|q| \rightarrow \infty}{\sim} \exp \left[-\alpha \frac{|q|^3}{t} \right]. \quad (6)$$

Sethuraman et Varadhan ont par la suite montré [96] que la distribution de la position d'une particule dont on suit le mouvement du temps 0 au temps t obéit à une décroissance similaire.

Nous avons ensuite cherché à retrouver, puis à généraliser ces résultats par une approche macroscopique : la théorie macroscopique des fluctuations développée par L. Bertini et al. [6–15]. Contrairement à l'Ansatz de Bethe, cette approche présente l'avantage de s'appliquer à n'importe quel système diffusif, permettant ainsi de s'affranchir totalement des détails de sa dynamique microscopique : elle a permis de calculer ainsi, de manière très générale, les fluctuations du courant Q_t dans des géométries présentant un état stationnaire, comme celle d'un segment faisant pont entre deux réservoirs (sections 3.1 et 3.2).

La géométrie infinie considérée ici nous a conduit à appliquer cette théorie à un système complètement transient. Malheureusement, nous n'avons pu aboutir à une expression analytique de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ que dans quelques cas très simples (section 6.3.2) : en particulier, nous n'avons pas été en mesure de retrouver l'expression analytique (4) fournie par l'approche microscopique pour l'exclusion symétrique.

Néanmoins, il nous a été possible de retrouver, et de généraliser, la dépendance en un paramètre (5) présentée par cette expression (chapitre 6.4). De plus, Nous avons également pu généraliser le phénomène de décroissance non-gaussienne (6) à d'autres systèmes (section 6.5) ; enfin, nous avons pu démontrer, à partir des symétries de la théorie, un analogue du théorème des fluctuations de Galavotti et Cohen hors d'état stationnaire pour cette géométrie infinie (section 6.2).

Modèles de gaz sur réseau

Le terme de "gaz sur réseau" désigne une classe de modèles microscopiques dans lesquels l'espace est discrétisé : dans le cas des modèles (unidimensionnels) étudiés dans cette partie, celui-ci est donc divisé en une ligne infinie de sites $i \in \mathbb{Z}$.

Par analogie avec les gaz usuels, chaque site i est occupé par un nombre entier τ_i de particules indistinguables : la donnée du jeu des (τ_i) définit la configuration du système.

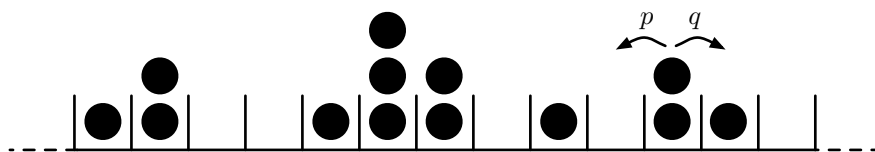


FIGURE 1.1 – "Zero-range process" (ZRP) simple sur la ligne infinie.

Les particules suivent une évolution stochastique à temps continu simple : chacune d'entre elles peut "sauter" vers le site immédiatement à sa gauche à un taux $p \geq 0$ et vers le site immédiatement à sa droite à un taux $q \geq 0$. Le modèle obtenu est un cas particulier de "zero-range process" (ZRP) [42, 56] : il est dit "totalement asymétrique" si $p = 0$ ou $q = 0$, et "symétrique" lorsque $p = q$. Dans ce dernier cas, il se comporte comme un ensemble de particules browniennes indépendantes : il constitue ainsi notre premier exemple de système diffusif.

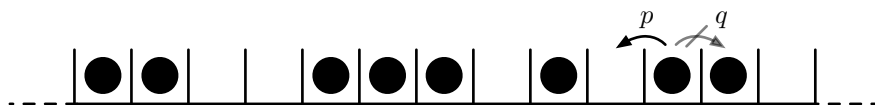


FIGURE 1.2 – Processus d'exclusion simple (ASEP) sur la ligne infinie.

Les particules du ZRP n'interagissant pas entre elles, le comportement du modèle correspondant est très facile à calculer. Il est toutefois possible d'ajouter de telles interactions entre particules, par exemple en ajoutant la contrainte d'exclusion de la figure 1.2.

Le modèle obtenu est connu sous le nom de processus d'exclusion simple : asymétrique (ASEP) pour $p \neq q$, totalement asymétrique (TASEP) pour $p = 0$, et symétrique (SSEP) pour $p = q$. Dans ce modèle, chaque site ne peut être occupé que par une seule particule au plus, et les déplacements qui conduiraient une particule à en chevaucher une autre sont interdits : l'interaction correspondante est une sorte de répulsion de cœur dur. Le SSEP jouera un rôle prépondérant dans la suite de ce mémoire.

Signalons enfin un dernier exemple de système diffusif, introduit par Kipnis, Marchorio et Presutti :

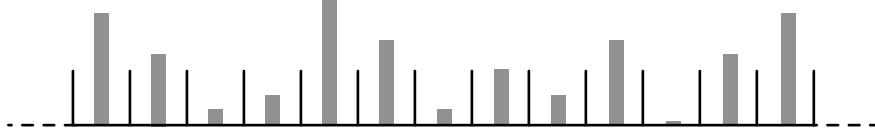


FIGURE 1.3 – Modèle de Kipnis-Marchorio-Presutti (KMP) sur la ligne infinie.

Dans ce modèle, chaque site $i \in \mathbb{Z}$ est caractérisé par une énergie $\varepsilon_i \geq 0$. Les sites i et $i + 1$ interagissent en "partageant" leurs énergies : après avoir attendu un temps exponentiel de moyenne 1, un nombre $a \in [0, 1]$ est choisi aléatoirement, et les deux sites redistribuent leurs énergies de la manière suivante :

$$\begin{cases} \varepsilon_i \rightarrow a\varepsilon_i + (1 - a)\varepsilon_{i+1} \\ \varepsilon_{i+1} \rightarrow a\varepsilon_{i+1} + (1 - a)\varepsilon_i \end{cases}.$$

Les trois gaz sur réseau présentés ci-dessus sont tous diffusifs, et ont même, du point de vue de la théorie macroscopique de la section 2.2, des coefficients de diffusion identiques. Toutefois, leurs dynamiques microscopiques conduisent à des fluctuations de courant complètement différentes, comme nous le verrons par la suite.

Approches théoriques hors d'équilibre

2.1 Ansatz de Bethe pour le SSEP

Parmi les différents gaz sur réseau exposés ci-dessus, le modèle d'exclusion symétrique (fig. 1.2) a pour particularité d'être exactement soluble au niveau microscopique, à l'aide d'un ansatz de Bethe : cette propriété nous a permis de calculer exactement les fluctuations de courant de ce modèle sur la ligne infinie.

Cette intégrabilité provient du fait que, pour un modèle d'exclusion simple, l'équation maîtresse décrivant l'évolution du système peut se résoudre exactement. Le cas particulier de l'exclusion symétrique possède une propriété supplémentaire : les fonctions de corrélations $\langle \tau_{i_1} \dots \tau_{i_k} \rangle$ des taux d'occupation $\tau_i \in \{0, 1\}$ des sites obéissent à des équations d'évolutions fermées. Ainsi

$$\begin{aligned} \frac{d \langle \tau_i \rangle}{dt} &= [\langle \tau_{i-1}(1 - \tau_i) \rangle + \langle \tau_{i+1}(1 - \tau_i) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i-1}) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle] \\ &= [\langle \tau_{i-1} \rangle + \langle \tau_{i+1} \rangle - 2 \langle \tau_i \rangle] \end{aligned}$$

de telle sorte que l'occupation moyenne $\langle \tau_i \rangle$ suit une diffusion discrète. De même, pour $i < j$,

$$\frac{d \langle \tau_i \tau_j \rangle}{dt} = \begin{cases} \langle \tau_{i-1} \tau_j \rangle + \langle \tau_{i+1} \tau_j \rangle + \langle \tau_i \tau_{j-1} \rangle + \langle \tau_i \tau_{j+1} \rangle - 4 \langle \tau_i \tau_j \rangle & \text{si } j \neq i+1 \\ \langle \tau_{i-1} \tau_{i+1} \rangle + \langle \tau_i \tau_{i+2} \rangle - 2 \langle \tau_i \tau_{i+1} \rangle & \text{pour } j = i+1. \end{cases}$$

Plus généralement, soit $I = \{i_1, \dots, i_n\}$ un ensemble de n sites et $\langle \tau_I \rangle = \langle \tau_{i_1} \dots \tau_{i_n} \rangle$ la fonction de corrélation des occupations de ces sites : alors $\langle \tau_I \rangle$ évolue selon

$$\frac{d \langle \tau_I \rangle}{dt} = \sum_{i \in I} \sum_{\substack{j=i \pm 1 \\ j \notin I}} [\langle \tau_j \tau_{I \setminus \{i\}} \rangle - \langle \tau_I \rangle]. \quad (2.2)$$

Lorsque les points de I ne sont pas voisins les uns des autres, ces équations se réduisent à une diffusion n -dimensionnelle : leurs fonctions propres sur la ligne infinie prennent la

forme

$$\langle \tau_I \rangle \propto z_1^{i_1} \dots z_n^{i_n} \exp \left[t \sum_{k=1}^n (z_k + 1/z_k - 2) \right] \equiv \Phi_t(i_1, \dots, i_n, z_1, \dots, z_n)$$

pour $z_1, \dots, z_n \in \mathbb{C}$. Toutefois, les $\Phi_t(i_1, \dots, i_n, z_1, \dots, z_n)$ ne satisfont pas les équations (2.2) lorsque deux points sont voisins : par rapport aux équations de diffusion n -dimensionnelle satisfaites par les Φ_t , les véritables fonctions propres de (2.2), $\langle \tau_I \rangle = \varphi_t(i_1, \dots, i_n)$ doivent satisfaire les "conditions de contact" suivantes :

$$\varphi_t(i_1, \dots, i, i, \dots, i_n) + \varphi_t(i_1, \dots, i+1, i+1, \dots, i_n) = 2\varphi_t(i_1, \dots, i, i+1, \dots, i_n). \quad (2.3)$$

Remarquons que ces conditions ne portent que sur des paires d'indices consécutifs : il n'est pas nécessaire de remplir de "conditions à trois particules" ou plus pour satisfaire (2.2). Cette "réduction à deux particules" rend l'Ansatz de Bethe possible.

Celui-ci a été introduit à l'origine pour déterminer la fonction d'ondes à n excitations d'une chaîne de spins quantiques. Ici, il consiste à rechercher les $\varphi_t(i_1, \dots, i_n)$ comme une combinaison linéaire de fonctions $\Phi_t(i_1, \dots, i_n, z_1, \dots, z_n)$ dont les indices (i_1, \dots, i_n) sont permutés :

$$\begin{aligned} \varphi_t(i_1, \dots, i_n, z_1, \dots, z_n) &= \sum_{\sigma \in S_n} A_\sigma \Phi_t(i_{\sigma(1)}, \dots, i_{\sigma(n)}, z_1, \dots, z_n) \\ &= \sum_{\sigma \in S_n} A_\sigma \prod_{k=1}^n e^{t(z_k + 1/z_k - 2)} z_{\sigma(k)}^{i_k}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

où la somme sur les permutations σ de $\{1, \dots, n\}$ court sur le groupe symétrique S_n .

Sur la ligne infinie, il a été initialement développé pour le TASEP par Johansson et Schutz, puis pour l'ASEP par Tracy et Widom. Ceux-ci ont déterminé que les conditions de contact (2.3) peuvent être satisfaites en choisissant

$$A_\sigma = \varepsilon(\sigma) \prod_{k < l} \frac{z_{\sigma(k)} z_{\sigma(l)} + 1 - 2z_{\sigma(k)}}{z_k z_l + 1 - 2z_k}.$$

où $\varepsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation $\sigma \in S_n$. Une fois les fonctions propres des équations d'évolution (2.2) connues, il devient possible de calculer exactement les fonctions de corrélations $\langle \tau_I \rangle$ à tout temps par combinaison linéaire : c'est ce que nous ferons dans le chapitre 5.

2.2 Théorie macroscopique des fluctuations

Les approches microscopiques, tel l'Ansatz de Bethe présenté ci-dessus, ont pour inconvénient fondamental de dépendre fortement des détails de la dynamique microscopique du système étudié : il est a priori impossible de généraliser les résultats obtenus pour un modèle précis à un autre modèle.

Le but de la théorie macroscopique des fluctuations est de fournir une description plus générale des systèmes hors d'équilibre. Son point de départ est la notion d'équilibre local : l'idée est de chercher à appliquer des outils *a priori* limités au voisinage de l'équilibre,

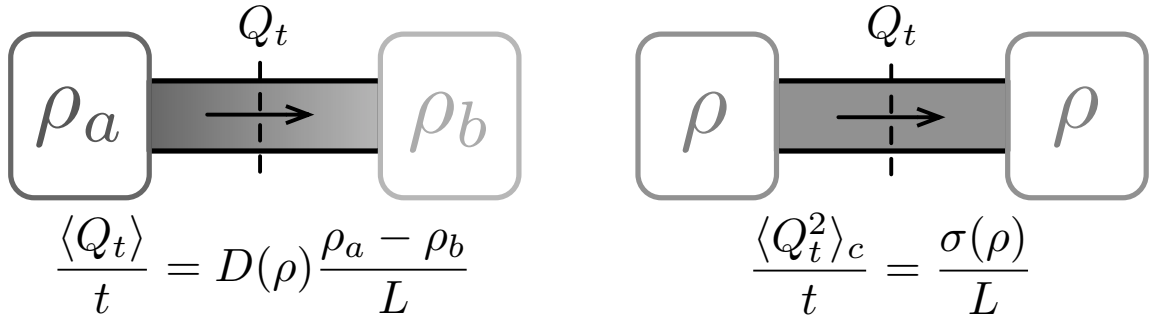


FIGURE 2.1 – Réponse linéaire à un gradient de densité ρ d'un système diffusif 1D, de longueur L , conservant le nombre de particules. Après un temps t suffisamment long, le nombre de particules Q_t ayant traversé une section du système croît linéairement avec t , indépendamment de la position de cette section : sa moyenne et sa variance, toutes deux en $1/L$, sont caractérisées par des coefficients $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$.

comme la théorie de la réponse linéaire, à une échelle "mésoscopique" intermédiaire entre l'échelle microscopique (où les détails de la dynamique jouent un rôle important) et macroscopique (où l'aspect hors d'équilibre est prépondérant).

Considérons le cas d'un système diffusif, à une dimension, conservant une seule quantité, que nous assimilerons à un nombre de particules : soit ρ la densité associée. Le qualificatif de "diffusif" indique que ce système réagit linéairement à un faible gradient de densité en établissant un courant de particules, vérifiant la loi de Fourier, dans la direction opposée au gradient ; de plus, ce courant subsiste (bien qu'il soit de moyenne nulle) même en l'absence de gradient de densité. Les coefficients de réponse linéaire caractérisant ce comportement, $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$, sont définis dans la figure 2.1 : ils sont reliés par une relation de fluctuation-dissipation,

$$f''(\rho) = \frac{2D(\rho)}{\sigma(\rho)}, \quad (2.5)$$

où $f(\rho)$ est telle que la fonction de partition d'un système de taille L à la densité ρ soit $e^{-Lf(\rho)}$.

Par rapport à une approche microscopique, telle l'Ansatz de Bethe décrit dans la section précédente, cette description présente l'avantage de s'appliquer potentiellement à tout système obéissant au comportement diffusif de la figure 2.1. On peut citer, en particulier [80, 81] :

$$\begin{aligned} \text{modèle ZRP (fig. 1.1)} : & \begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2\rho \end{cases} \\ \text{modèle SSEP (fig. 1.2)} : & \begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho) \end{cases} \\ \text{modèle KMP (fig. 1.3)} : & \begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2\rho^2 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Considérons maintenant un système de taille L évoluant loin de l'équilibre. Nous cherchons à le décrire à travers un champ de densité présentant un "scaling" diffusif, en considérant que la densité moyenne d'une région située en $0 \leq X \leq L$ à l'instant t est une fonction $\rho(x, \tau) = \rho(X/L, t/L^2)$. À cause de la conservation du nombre de particules, l'évolution de la densité $\rho(x, \tau)$ est dictée par un courant $j(x, \tau)$:

$$\partial_t \rho(x, \tau) = -\partial_x j(x, \tau). \quad (2.7)$$

En faisant l'hypothèse que la théorie de la réponse linéaire (fig. 2.1) s'applique localement, on peut alors exprimer $j(x, \tau)$ comme

$$j(x, \tau) = -D(\rho) \partial_x \rho + \sqrt{\sigma(\rho)} \frac{\eta(x, \tau)}{\sqrt{L}}, \quad (2.8)$$

où $\eta(x, \tau)$ est un bruit blanc gaussien de variance 1 : $\langle \eta(x, \tau) \eta(x', \tau') \rangle = \delta(x - x') \delta(\tau - \tau')$. (2.8) correspond à une "loi de Fourier bruitée" sur $j(x, \tau)$: son terme stochastique, bien que sous-dominant est indispensable pour que la relation de fluctuation-dissipation (2.5) soit satisfaite.

(2.7) et (2.8) sont connues sous le nom d'"hydrodynamique fluctuante" : son introduction, dans le contexte de l'équation de Boltzmann, remonte aux années 1960 [16, 68].

Plus récemment, L. Bertini et al. [6, 7, 9–11, 15] ont reformulé (2.8) sous la forme d'un principe de grandes déviations, qui constitue la "théorie macroscopique des fluctuations" à proprement parler. Selon ce principe, la probabilité d'observer une certaine évolution $\rho(x, \tau)$ du champ de densité se comporte comme

$$\text{Pro}[\rho(x, \tau)] \propto \exp \left[-L \int_0^1 dx \int_0^{t/L^2} d\tau \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right]. \quad (2.9)$$

Le membre de droite de (2.9) correspond au "coût" de la valeur que le bruit gaussien $\eta(x, \tau)$ présent dans (2.8) doit prendre pour obtenir l'évolution de la densité $\rho(x, \tau)$ souhaitée. Bertini et al. sont parvenus à démontrer mathématiquement l'exactitude de ce principe de grandes déviations pour un grand nombre de systèmes microscopiques.

De cette manière, la plupart des propriétés du système hors d'équilibre peuvent être calculées en résolvant un problème variationnel faisant intervenir (2.9). Par exemple, la distribution à l'état stationnaire (éventuellement hors d'équilibre) du profil de densité $\rho(x, \tau)$, $P_{\text{stat.}}[\mu] \equiv \text{Pro}[\rho(x, \tau) \simeq \mu(x)]$, satisfait à

$$\log P_{\text{stat.}}[\mu] \simeq \max_{\rho, j} \left[-L \int_0^1 dx \int_{-\infty}^0 d\tau \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right]$$

où le maximum court sur l'ensemble des profils de densité $\rho(x, \tau)$ et de courant $j(x, \tau)$ pour $(x, \tau) \in [0, 1] \times [-\infty, 0]$ satisfaisant la relation de conservation (2.7) et la contrainte $\rho(x, 0) = \mu(x)$.

De même, la fonction génératrice du courant total pendant un temps t , Q_t , peut être calculée : le temps microscopique $[0, t]$ correspondant à un temps diffusif $\tau \in [0, t/L^2]$, on peut écrire

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \max_{\rho, j} L \int_0^1 dx \int_0^{t/L^2} d\tau \left[\lambda j - \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right] \quad (2.10)$$

Les sections 3.2 et 3.1 constituent des exemples de résultats obtenus, par cette méthode, pour des systèmes diffusifs, ouverts ou périodiques : dans les deux cas, la fonction génératrice $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ peut être calculée exactement, et ce quelles que soient les fonctions $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$.

Résultats connus sur les fluctuations de courant

Cette partie est consacrée à la présentation de l'état actuel des connaissances sur les fluctuations de courant de systèmes hors d'équilibre. Les résultats exposés dans les deux premières sections ont été obtenus par le biais de la théorie macroscopique des fluctuations (voir 2.2) : ils s'appliquent donc indifféremment à tout système diffusif conservant une seule quantité, en géométrie ouverte (section 3.1) ou périodique (section 3.2). Les résultats présentés dans la section suivante portent sur la géométrie infinie : ils ont tous pour origine un Ansatz de Bethe microscopique, et sont donc pour la plupart limités à l'ASEP (section 3.3). Enfin, la section 3.4 présente quelques résultats sur les fluctuations de courant dans des systèmes quantiques analogues aux systèmes classiques que nous avons étudiés.

3.1 Système ouvert : état stationnaire hors d'équilibre

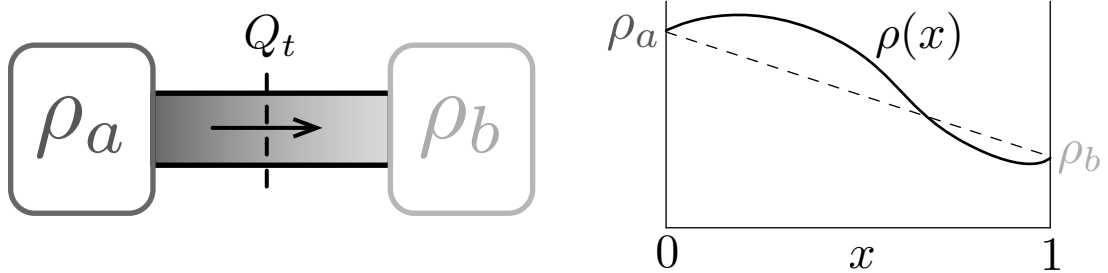


FIGURE 3.1 – Détermination de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ à l'aide de la théorie macroscopique des fluctuations (2.10) pour un système diffusif ouvert situé entre deux réservoirs de densités ρ_a et ρ_b . Pour une valeur donnée du forçage λ , il est suffisant de déterminer le profil optimal dans (2.10) sous la forme d'un profil stationnaire : $\rho(x, \tau) = \rho(x)$ et $j(x, \tau) = J$.

Dans un article de 2004, Thierry Bodineau et Bernard Derrida [17] ont appliqué la

théorie macroscopique des fluctuations (section 2.2) au calcul des fluctuations de courant d'un système diffusif, de taille L , situé entre deux réservoirs de densités ρ_a et ρ_b .

Calculer les fluctuations de courant dans un tel système revient à résoudre le problème variationnel donnant la fonction génératrice $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ (2.10) pour un système ouvert. Les auteurs font l'hypothèse que, pour λ proche de 0, la solution de ce problème est un profil de densité $\rho(x, \tau) = \rho(x)$ stationnaire : par l'équation de conservation (2.7), le courant $j(x, \tau) = J$ est constant et indépendant de x . Ceci conduit à une expression simplifiée de (2.10) dans laquelle le temps n'apparaît plus :

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \frac{t}{L} \max_{\rho(x), J} \int_0^1 dx \left[\lambda J - \frac{(J + D(\rho(x))\rho'(x))^2}{2\sigma(\rho(x))} \right]. \quad (3.1)$$

L'équation d'optimisation de $\rho(x)$ dans le maximum ci-dessus est a priori de degré 2 en espace. Elle peut se réécrire

$$J^2 \frac{\sigma'(\rho)}{2\sigma(\rho)^2} + \frac{D(\rho)^2}{\sigma(\rho)} \partial_x^2 \rho + (\partial_x \rho) \left(\partial_x \frac{D(\rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right) = 0.$$

Après multiplication par $\partial_x \rho$, cette équation s'intègre en

$$-\frac{J^2}{2\sigma(\rho)} + \frac{D(\rho)^2}{2\sigma(\rho)} (\partial_x \rho)^2 = C$$

avec C une constante d'intégration : soit $(D(\rho)\partial_x \rho)^2 = J^2 + 2C\sigma(\rho)$. Pour continuer, il nous faut déterminer le signe de $\partial_x \rho$: ceci est possible lorsque le forçage λ est petit. Alors le profil est proche de celui de l'état stationnaire en l'absence de forçage, caractérisé par $J = J_{\text{stat.}} = -D(\rho)\partial_x \rho$: pour $\rho_a > \rho_b$, $J_{\text{stat.}}$ est positif soit $\partial_x \rho < 0$.

Il est donc raisonnable de penser que, pour $\rho_a > \rho_b$ et λ petit, $\partial_x \rho$ est négatif, soit

$$D(\rho)\partial_x \rho = -J\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}. \quad (3.2)$$

avec $K = C/J^2$. Cette relation fixe la constante K en fonction de J , par

$$J = - \int_0^1 dx \frac{D(\rho)\partial_x \rho}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} = \int_{\rho_b}^{\rho_a} d\rho \frac{D(\rho)}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}}.$$

Après substitution de (3.2) dans (3.1) et optimisation sur J , on obtient

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = -\frac{t}{L} K \left[\int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)d\rho}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} \right]^2 \quad (3.3)$$

où $K = K(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ est maintenant relié à λ par

$$\lambda = \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{d\rho D(\rho)}{\sigma(\rho)} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} - 1 \right].$$

Pour la géométrie ouverte, il est donc possible d'obtenir une expression analytique (bien que paramétrique) de la fonction génératrice du courant Q_t dans l'état stationnaire pour tout système diffusif, caractérisé par ses fonctions $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$.

Un phénomène remarquable se produit dans le cas de l'exclusion symétrique, pour laquelle $D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$ par (2.6) : alors (3.3) se simplifie en

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \frac{t}{L} \left[\log(\sqrt{1 + \omega} - \sqrt{\omega}) \right]^2$$

avec $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ défini par (5). Ainsi, la dépendance en un seul paramètre ω , que nous obtenons dans la section 5.1 sur le système infini, est déjà présente dans le système ouvert. En réalité, le raisonnement de la section 5.1 s'applique au processus d'exclusion symétrique indépendamment du réseau sur lequel on le considère, ce qui explique cet état de fait. De même, la justification de cette invariance à partir de la théorie macroscopique des fluctuations, que nous avons développée pour la géométrie infinie dans la section 6.4, peut également se faire dans le cas ouvert [99].

3.2 Géométrie périodique : autour de l'équilibre

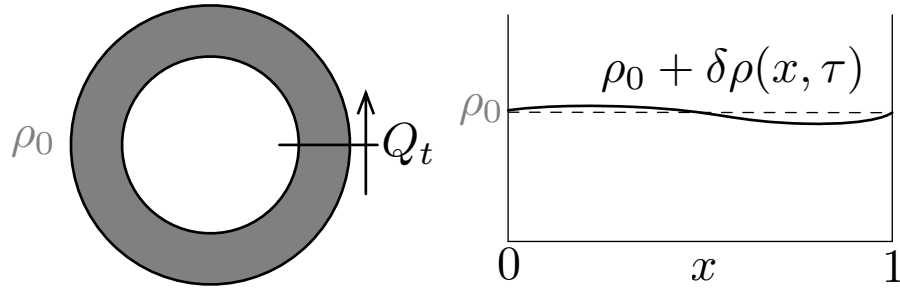


FIGURE 3.2 – Détermination de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ dans un système diffusif périodique de longueur L et de densité moyenne ρ_0 . Les fluctuations de Q_t sont gaussiennes à l'ordre dominant (3.5) ; des corrections d'ordre supérieur peuvent être calculées en considérant de faibles variations de la densité autour du profil optimal, $\rho(x, \tau) = \rho_0$ (3.10).

L'expression de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ donnée par la théorie macroscopique des fluctuations (2.10) se simplifie encore davantage lorsque l'on considère un système diffusif périodique, de longueur L . Un tel système est caractérisé par sa densité moyenne ρ_0 : il est alors possible de satisfaire l'optimum de (2.10) en choisissant

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) = \rho_0 \\ j(x, \tau) = \sigma_0 \lambda \end{cases} \quad (3.4)$$

avec $\sigma_0 \equiv \sigma(\rho_0)$. Nous obtenons donc

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \frac{t}{L} \frac{\sigma_0 \lambda^2}{2} : \quad (3.5)$$

ainsi, dans cette géométrie à l'équilibre, Q_t est, à l'ordre dominant, une variable gaussienne. Dans un article de 2008, Appert, Derrida, Lecomte et van Wijland [2] se sont

proposés de calculer des corrections d'ordre supérieur à cette fonction génératrice. Leur approche consiste à considérer que le principe de grandes déviations (2.9) n'est que l'ordre dominant d'une intégrale fonctionnelle, de telle sorte que (2.10) devient

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle \propto \int \mathcal{D}[\rho(x, \tau)] \mathcal{D}[j(x, \tau)] \exp \left[L \int_0^1 dx \int_0^{t/L^2} d\tau \left(\lambda j - \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right) \right] \quad (3.6)$$

où l'intégrale fonctionnelle s'effectue sur tous les profils $\rho(x, \tau)$ et $j(x, \tau)$ compatibles avec les conditions de conservation $\partial_x j + \partial_\tau \rho = 0$ et avec $\int dx \rho(x, \tau) = \rho_0$.

Contrairement au principe de grandes déviations (2.9), ce formalisme n'a pas reçu à ma connaissance de justification mathématique rigoureuse. D'après lui, (3.5) s'obtient en appliquant la méthode du col à (3.6) : toutefois, les fluctuations autour du profil optimal (3.4) devraient être à l'origine de corrections d'ordre supérieur dans (3.5). À cause de la simplicité de ce profil optimal, il est possible de prendre en compte ces fluctuations : on peut considérer des profils perturbés de la forme

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) = \rho_0 + \sum_{k, \omega} k [a_{k\omega} e^{i(kx - \omega t)} + \text{cc.}] \\ j(x, \tau) = \sigma_0 \lambda + \sum_{k, \omega} \omega [a_{k\omega} e^{i(kx - \omega t)} + \text{cc.}] \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} k = 2\pi n & , n \geq 1 \\ \omega = \frac{2\pi m}{t/L^2} & , m \in \mathbb{Z}^* \end{cases} \quad (3.7)$$

où les amplitudes $a_{k\omega} \in \mathbb{C}$ des différents modes de fluctuations sont petites. À l'ordre dominant, ces fluctuations n'interagissent pas entre elles, de telle sorte que

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle \propto \int \left[\prod_{k, \omega} da_{k\omega} da_{k\omega}^* \right] \exp \left[\frac{t}{L} \frac{\sigma_0 \lambda^2}{2} - \sum_{k, \omega} \left(\frac{(\omega - \lambda k)^2 + D_0^2 k^4}{\sigma_0} - \frac{\lambda^2 \sigma_0'' k^2}{2} \right) |a_{k\omega}|^2 \right].$$

avec $D_0 \equiv D(\rho_0)$ et $\sigma_0'' \equiv \sigma''(\rho_0)$. L'intégration des fluctuations (gaussiennes) des $a_{k\omega}$ conduit donc à

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \frac{t}{L} \frac{\sigma_0 \lambda^2}{2} - \sum_{k, \omega} \log \left(\frac{(\omega - \lambda k)^2 + D_0^2 k^4}{\sigma_0} - \frac{\lambda^2 \sigma_0'' k^2}{2} \right) + C. \quad (3.8)$$

Remarquons l'apparition d'une constante additive C dans cette dernière expression, due à la définition de l'intégrale fonctionnelle (3.6) à une constante (multiplicative) près. Comme nous allons le voir ci-dessous, (3.8) est en apparence divergente : C a pour rôle de "renormaliser" cette expression pour aboutir à l'expression finale.

Dans la somme sur les modes de (3.8), la variable ω devient continue dans la limite $t \rightarrow \infty$. Il est donc possible de la remplacer par une intégrale :

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \frac{t}{L} \frac{\sigma_0 \lambda^2}{2} - \frac{t}{2\pi L^2} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \log \left(\frac{(\omega - \lambda k)^2 + D_0^2 k^4}{\sigma_0} - \frac{\lambda^2 \sigma_0'' k^2}{2} \right) + C.$$

Chacune des intégrales en ω de cette expression diverge. Toutefois, le premier terme non divergent en Ω de $\int_{-\Omega}^{\Omega} d\omega \log P(\omega)$, où $P(\omega)$ est un polynôme en ω , fait intervenir les

racines ω_i de $P(\omega)$, sous la forme

$$\int_{-\Omega}^{\Omega} d\omega \log P(\omega) = 2\deg(P)\Omega \log \Omega + i\pi \left(\sum_{\text{Im}[\omega_i] > 0} \omega_i - \sum_{\text{Im}[\omega_i] < 0} \omega_i \right).$$

Nous obtenons donc, en supposant que λ est petit (puisque nous recherchons les cumulants de Q_t),

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \frac{t}{L} \frac{\sigma_0 \lambda^2}{2} - \frac{t}{L^2} \sum_k k \sqrt{D_0^2 k^2 - \frac{\sigma_0'' \sigma_0}{2}} \lambda^2 + C'. \quad (3.9)$$

La somme sur k dans l'expression ci-dessus est elle aussi divergente. Toutefois, il est possible de lui appliquer un procédé de "resommation", courant dans le traitement des intégrales fonctionnelles en physique : il consiste ici à développer en puissances de λ chaque terme de (3.9), puis à étudier séparément la convergence de chaque série en λ^{2n} .

Dans (3.9), seuls les termes en λ^0 et en λ^2 du développement en λ ainsi obtenus divergent. Le terme d'ordre λ^0 est compensé par l'ajustement de la constante C' (qui doit être choisie de telle sorte que (3.9) s'annule pour $\lambda = 0$) ; la divergence du terme en λ^2 , quant à elle, se traduit par l'impossibilité de prédire par intégration fonctionnelle le comportement à l'ordre $1/L^2$ du deuxième cumulant de Q_t , $\langle Q_t^2 \rangle_c$. En revanche, les termes restants de (3.9) (d'ordre λ^{2n} pour $n \geq 2$) convergent, et permettent de prédire les cumulants de Q_t d'ordre 4 et plus : au-delà du 2^e cumulant, la fonction génératrice s'écrit

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle - \frac{\lambda^2}{2} \langle Q_t^2 \rangle_c = \frac{t}{L^2} D_0 \mathcal{F} \left(\frac{\sigma_0 \sigma_0''}{16 D_0^2} \lambda^2 \right) \quad (3.10)$$

avec $\mathcal{F}(u) = -4 \sum_{n \geq 1} [n\pi \sqrt{n^2 \pi^2 - 2u} - n^2 \pi^2 + u]$. Ainsi, les fluctuations autour du profil optimal de (2.10) ont pour conséquences des corrections sous-dominantes à la loi gaussienne de Q_t (3.5) : ces corrections, à l'origine de cumulants $\langle Q_t^n \rangle_c \propto t/L^2$ pour $n \geq 4$, font intervenir une fonction $\mathcal{F}(u)$ universelle, puisqu'elle est indépendante du système diffusif choisi. Remarquons que cette approche a été par la suite généralisée à des systèmes ouverts [62].

3.3 Exclusion asymétrique sur la ligne infinie

L'étude du courant de particules dans un système en "créneau", auquel nous nous intéresserons pour un système diffusif dans le corps de cette partie, a fait jusqu'à présent l'objet de travaux dans un cas différent : celui d'un processus d'exclusion asymétrique pour lequel $q > p$. Un tel système est décrit, au niveau macroscopique, par une équation de Burgers bruitée, et appartient qualitativement à la classe d'universalité identifiée par Kardar, Parisi et Zhang en 1986 [66].

Dès 2000, Johansson [65] a analysé les fluctuations de courant pour un processus totalement asymétrique ($p = 0$, $q = 1$). Le modèle se simplifie de manière importante dans ce cas, puisque le mouvement de chaque particule n'est pas affecté par celui de la

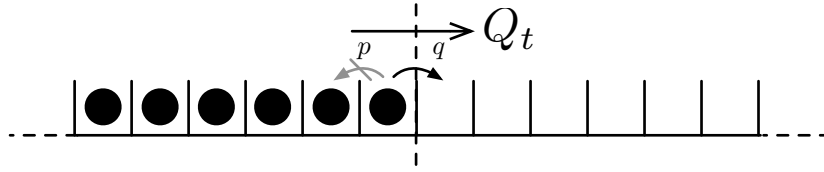


FIGURE 3.3 – Condition initiale en créneau pour un processus d'exclusion asymétrique sur la ligne infinie. Pour $p \neq q$, les fluctuations de Q_t sont prédites par le scaling de la classe d'universalité KPZ : $\langle Q_t \rangle \propto t$ et $\langle Q_t^n \rangle_c \propto t^{1/3}$ pour $n \geq 2$.

particule qui la "suit" sur la ligne : cette simplification se traduit dans l'Ansatz de Bethe, et permet de calculer la loi de Q_t .

En 2009, Tracy et Widom [100, 101] ont généralisé ce résultat à un processus partiellement asymétrique, pour lequel $0 \leq p < q$, grâce à l'utilisation de nombreuses identités remarquables. Le résultat obtenu est le suivant :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{Pro} \left[\frac{Q_t - (q - p)t/4}{(t/16)^{1/3}} \leq s \right] = 1 - F_2(-s)$$

où $F_2(s)$ est la distribution de Tracy-Widom : la loi limite (après rescaling) de la plus grande valeur propre d'une matrice aléatoire hermitienne $n \times n$ pour $n \rightarrow \infty$.

Lorsque l'asymétrie est faible ($|p - q| \ll 1$), le système se comporte au départ comme un processus symétrique (tel que nous l'étudierons par la suite) avant de devenir asymétrique pour des temps de l'ordre de $(p - q)^{-2}$. L'étude de ce régime intermédiaire a été entreprise en 2010 par Sasamoto et Spohn [93].

3.4 Courant dans les systèmes quantiques

Les systèmes diffusifs qui font l'objet de cette partie sont tous classiques au niveau microscopiques. Certains d'entre eux ont des analogues quantiques : par exemple, à l'exclusion simple symétrique (figure 1.2) correspond un modèle de gaz sur réseau de fermions libres, où des particules quantiques se déplacent sous un réseau discret, le principe d'exclusion de Pauli jouant le rôle de la contrainte d'exclusion du système classique.

Sur un réseau unidimensionnel, le Hamiltonien d'un tel système prend la forme

$$\mathcal{H} = \sum_k [a_k^\dagger a_{k+1} + a_{k+1}^\dagger a_k]$$

où les a_k et a_k^\dagger sont respectivement, les opérateurs d'annihilation et de création d'une particule au site k . La présence ou l'absence d'une particule en k peuvent s'interpréter comme l'orientation *up* ou *down* d'un spin-1/2, pour lequel $a_k = S_k^{(x)} - iS_k^{(y)}$ avec $S_k^{(x)}$ l'opérateur de mesure du spin k dans la direction x . Le gaz de fermions libre se comprend alors comme un cas particulier d'un modèle plus général, le modèle XXZ , de Hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_k \left[S_k^{(x)} S_{k+1}^{(x)} + S_k^{(y)} S_{k+1}^{(y)} + \Delta S_k^{(z)} S_{k+1}^{(z)} \right].$$

Δ , qualifié de paramètre d'anisotropie, vaut 0 pour le gaz de fermions libres, qui prend donc aussi le nom de modèle XX .

Le courant de spins dans la chaîne XXZ a été étudié par T. Antal, P.L. Krapivsky et A. Rákos [1] sur la ligne infinie et par T. Prosen [90] en géométrie ouverte. Dans ce dernier cas, le courant moyen de spins traversant un segment de L spins ne dépend pas de L : cette conduction ballistique donne à la chaîne de spins le caractère d'un conducteur parfait.

Sur la ligne infinie, A. Rákos et al. ont pu calculer les deux premiers cumulants du courant de spins à travers l'origine dans une chaîne où, dans l'état initial, tous les spins à gauche de l'origine sont *up* et tous ceux de droite *down*. Ils ont obtenu, pour le modèle XX ,

$$\begin{cases} \langle Q_t \rangle \simeq \frac{t}{\pi} \\ \langle Q_t^2 \rangle_c \simeq \frac{\ln t}{2\pi^2} \end{cases}$$

Ces résultats sont à comparer à ceux que nous avons obtenus pour l'exclusion symétrique classique (chapitre 5), pour laquelle $\langle Q^n(t) \rangle_c \propto \sqrt{t}$. Ainsi, la conduction dans le système quantique est à la fois plus forte et moins bruitée que dans son pendant classique : la croissance linéaire de $\langle Q_t \rangle$ avec t suggère une conduction ballistique (contrairement à la conduction diffusive, en \sqrt{t} , du SSEP), tandis que la croissance logarithmique de $\langle Q_t^2 \rangle_c$ indique que cette l'évolution du système est très ordonnée par rapport au cas classique.

Cette faiblesse des fluctuations de courant ne se retrouve pas dans les systèmes quantiques désordonnés, caractérisés par la présence d'impuretés. Lee, Levitov et Yakovets ont pu calculer, dans [73], la distribution de courant dans un système quantique ouvert (entre deux réservoirs) comportant de telles impuretés : la distribution de courant obtenue prend la forme

$$\overline{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle} \propto t \operatorname{arcsinh} \sqrt{e^\lambda - 1},$$

où $\langle \cdot \rangle$ est la moyenne sur l'évolution quantique du système et où $\overline{\cdot}$ est la moyenne sur la distribution des impuretés (la moyenne sur le "désordre"). Ainsi, dans un tel système, tous les cumulants croissent linéairement en t , de même que dans un système diffusif ouvert (voir section 3.1).

Conditions initiales : cas recuit et gelé

Les résultats connus sur les fluctuations de courant, présentés ci-dessus, ont pour point commun de porter sur des systèmes présentant un état stationnaire, à l'équilibre pour un système périodique (section 3.2) ou hors d'équilibre pour un système ouvert (section 3.1). Pour des temps suffisamment longs, le comportement de Q_t est déterminé par celui du système autour de cet état stationnaire, quel que soit la situation dans laquelle le système a été placé à $t = 0$, l'effet de cette condition initiale s'estompant avec le temps.

Ceci n'est pas le cas lorsque l'on étudie une situation transiente, telle la situation en créneau sur la ligne infinie traitée dans cette partie. Si la condition initiale du système est aléatoire, alors la moyenne $\langle \cdot \rangle$ peut être séparée en deux : une moyenne $\overline{\cdot}$ sur la condition initiale et une moyenne $\langle \cdot \rangle$ sur l'évolution temporelle (elle-même stochastique) du système. On peut alors définir pour Q_t deux fonctions génératrices différentes [31, 96] :

- une fonction génératrice **recuite** :

$$F_t^{(r)}(\lambda) \equiv \log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \log \overline{\langle e^{\lambda Q_t} \rangle} ; \quad (4.1)$$

- une fonction génératrice **gelée** :

$$F_t^{(g)}(\lambda) \equiv \overline{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle} . \quad (4.2)$$

Dans la première définition, les fluctuations de la condition initiale contribuent aux fluctuations de courant (elles sont recuites) ; la seconde mesure, comme dans un système désordonné, les fluctuations de Q_t pour une condition initiale typique (elles sont gelées).

La figure 4.1 illustre cette différence pour le cas d'un SSEP de densités initiales $\rho_a = 0.3$ à gauche de l'origine et $\rho_b = 0.7$ à droite. Nous avons mesuré numériquement, pour $\lambda = 1$ et $0 \leq s \leq t$, les taux d'occupation biaisés

$$\langle \tau_i(s) \rangle_\lambda^{(r)} = \frac{\overline{\langle \tau_i(s) e^{\lambda Q_t} \rangle}}{\overline{\langle e^{\lambda Q_t} \rangle}} \text{ et } \langle \tau_i(s) \rangle_\lambda^{(g)} = \overline{\left[\frac{\langle \tau_i(s) e^{\lambda Q_t} \rangle}{\langle e^{\lambda Q_t} \rangle} \right]} . \quad (4.3)$$

Ces "profils microscopiques" sont reliés aux profils optimaux au sens de (2.10) des fonctions génératrices $F_t^{(r)}(\lambda)$ et $F_t^{(g)}(\lambda)$. En l'absence de biais, les deux coïncident et suivent

une évolution diffusive : le créneau initial de hauteurs ρ_a et ρ_b devient une fonction erreur de plus en plus large avec le temps.

En revanche, pour $\lambda > 0$, les profils optimaux se déforment pour permettre à un courant plus important de traverser l'origine entre 0 et t . Pour cela, $\langle \tau_i(s) \rangle_\lambda^{(r)}$ privilégie une condition initiale présentant un surplus de particules à gauche de 0 et un déficit de particules à droite ; en revanche, $\langle \tau_i(s) \rangle_\lambda^{(g)}$ n'est pas déformé.

Du point de vue de la théorie macroscopique des fluctuations (section 2.2), le choix d'une de ces deux moyennes ne pose pas de problème particulier : il revient à un choix de condition initiale dans le problème variationnel (2.10). La situation est beaucoup plus complexe d'un point de vue microscopique : en effet, pour l'exclusion symétrique, seule la fonction génératrice recuite (4.1) vérifie la dépendance en un paramètre (5). De même, le calcul exact issu de l'Ansatz de Bethe (4) est limité à cette même moyenne recuite, bien que des progrès aient été faits récemment dans le cas gelé [72]. De fait, la majeure partie des résultats que nous avons obtenus portent sur le cas recuit.

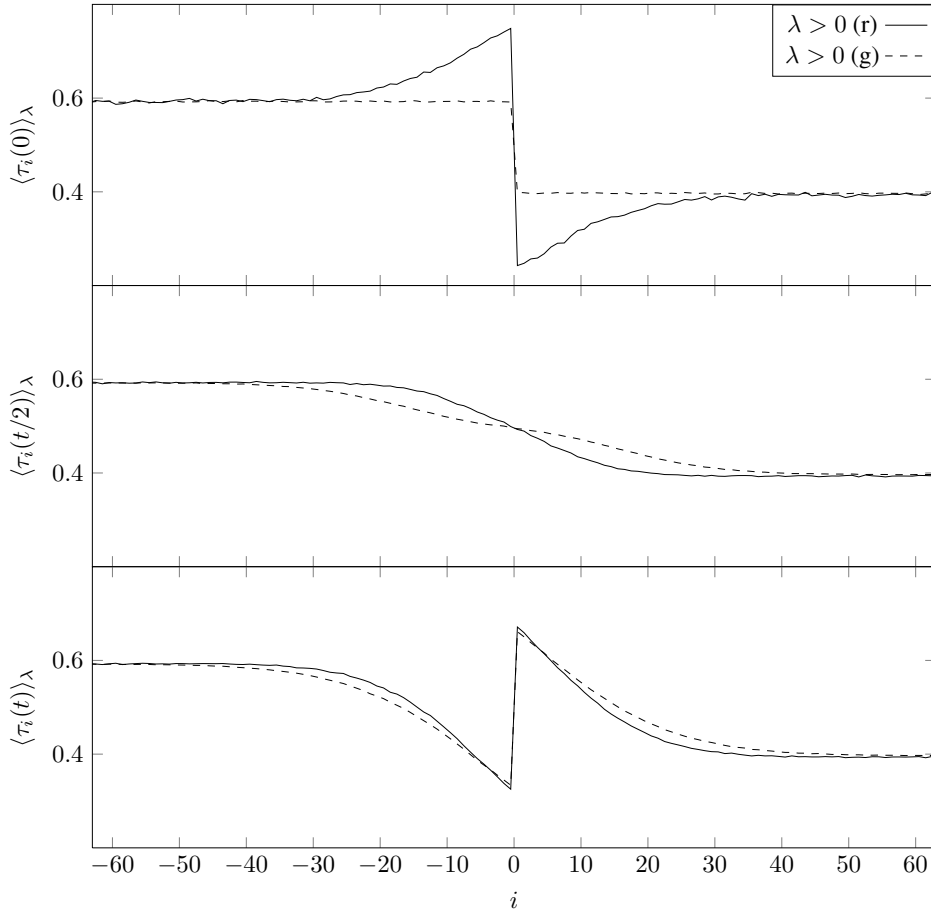


FIGURE 4.1 – Profils biaisés $\langle \tau_i(s) \rangle_\lambda$ (4.3) pour $t = 10$, $\lambda \in \{0, 3/2\}$ et $s \in \{0, t/2, t\}$. Lorsque $\lambda > 0$, le profil en fonction erreur $\langle \tau_i(s) \rangle_0$ se déforme pour favoriser le passage du courant Q_t : cette déformation touche la condition initiale dans le cas recuit, mais pas dans le cas gelé.

Calcul microscopique des fluctuations de courant du SSEP

5.1 Invariance de la fonction génératrice

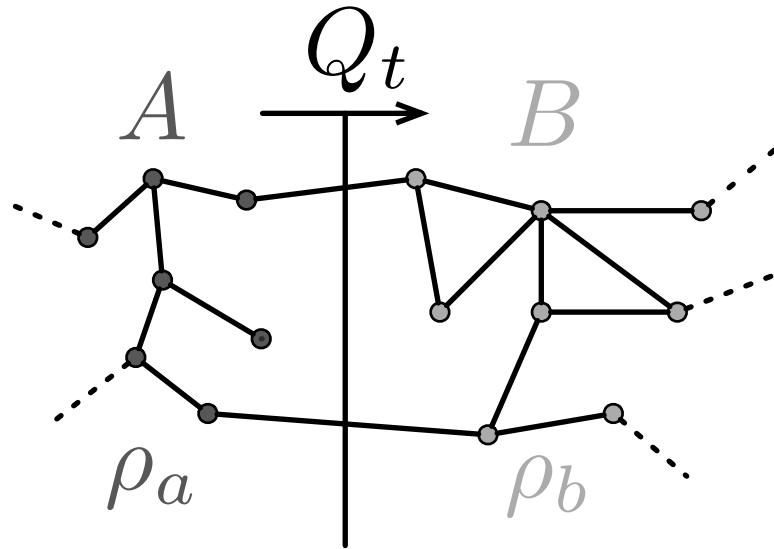


FIGURE 5.1 – Géométrie d'un processus d'exclusion symétrique (SSEP) pour lequel la fonction génératrice $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ ne dépend que du paramètre $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ (5).

Dans cette section, nous démontrons la dépendance en un seul paramètre $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ (5) de la fonction génératrice $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ du courant Q_t à travers l'origine d'un processus d'exclusion sur la ligne infinie dont les sites à gauche (resp. à droite) de l'origine sont initialement occupés avec une densité ρ_a (resp. ρ_b).

Nous allons voir que, d'un point de vue microscopique [32], cette invariance s'applique dans une situation plus générale, décrite par la figure 5.1 : si on considère, sur un réseau quelconque séparé en deux régions A et B , le courant Q_t qui circule de A vers B lorsque,

à l'état initial, les sites de A sont occupés avec une probabilité ρ_a et ceux de B le sont avec une probabilité ρ_b , alors $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ sera, à tout temps, fonction du seul paramètre ω . Notre raisonnement s'applique donc aussi à la géométrie ouverte de la section 3.1, pour laquelle la dépendance en ω avait été constatée.

Considérons d'abord un réseau conforme à la figure 5.1, fini, formé de N_a sites dans la région A et de N_b sites dans la région B . Il est alors possible de développer $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ de la manière suivante :

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \sum_{p=0}^{N_a} \sum_{q=0}^{N_b} [\rho_a^p (1 - \rho_a)^{N_a-p}] [\rho_b^q (1 - \rho_b)^{N_b-q}] R_{pq}(\lambda, t). \quad (5.1)$$

$R_{pq}(\lambda, t)$ correspond à la valeur prise par $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ lorsque, à l'état initial, p particules (placées au hasard) occupent la région A et q particules occupent la région B : il ne dépend donc pas de ρ_a ou de ρ_b . De plus, dans ce cas, Q_t ne peut prendre que les valeurs discrètes $\{-q, \dots, p\}$: par conséquent, $e^{\lambda q} R_{pq}(\lambda, t)$ est un polynôme de degré $p + q$ en e^λ . Finalement, en développant $(1 - \rho_a)^{N_a-p}$ et $(1 - \rho_b)^{N_b-q}$ dans (5.1), nous aboutissons à

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \sum_{p=0}^{N_a} \sum_{q=0}^{N_b} \rho_a^p \rho_b^q e^{-\lambda q} S_{pq}(\lambda, t), \quad (5.2)$$

où $S_{pq}(\lambda, t)$, combinaison linéaire des $R_{p'q'}(\lambda, t)$ pour $p' \leq p$ et $q' \leq q$, est aussi un polynôme de degré $p + q$ en e^λ .

Il nous est également possible de développer $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ en puissances de λ , sous la forme

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \sum_{n \geq 0} \frac{\lambda^n}{n!} \langle Q_t^n \rangle_{\rho_a, \rho_b}. \quad (5.3)$$

Comme Q_t s'exprime en fonction des variables d'occupation $\tau_i(t)$ des sites i du réseau par

$$Q_t = \sum_{i \in B} [\tau_i(t) - \tau_i(0)] = \sum_{i \in B} [\tau_i(0) - \tau_i(t)],$$

le n -ième moment de Q_t , $\langle Q_t^n \rangle$, est une combinaison linéaire de fonctions de corrélations à n points des τ_i , de la forme $\langle \tau_{i_1}(t) \tau_{i_2}(0) \dots \tau_{i_n}(t) \rangle$.

Il est facile de montrer que, pour un processus d'exclusion, ces fonctions de corrélation à deux temps obéissent, tout comme celles au temps t , à des équations d'évolution linéaires (2.2) : elles dépendent donc linéairement des fonctions de corrélation à n points des τ_i à l'instant 0, $\langle \tau_{i_1}(0) \dots \tau_{i_n}(0) \rangle$ (avec éventuellement des indices répétés parmi i_1, \dots, i_n). Or, ces dernières fonctions sont des polynômes de degré au plus n en (ρ_a, ρ_b) : ainsi, $\langle Q_t^n \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ est nécessairement un polynôme de degré n en (ρ_a, ρ_b) .

Comparons maintenant les développements (5.2) et (5.3). Dans (5.3), le terme d'ordre n est un polynôme de degré n en (ρ_a, ρ_b) : il ne peut donc contenir de termes en $\rho_a^p \rho_b^q$ que pour $p + q \leq n$. Le terme en $\rho_a^p \rho_b^q$ de (5.2) peut quant à lui se développer en puissances de λ pour $\lambda \simeq 0$: par contraposée de ce qui précède, le terme en λ^n de ce développement est nécessairement nul lorsque $n < p + q$. Ainsi

$$\frac{d^n}{d\lambda^n} [e^{-\lambda q} S_{pq}(\lambda, t)] = 0 \text{ pour tout } n < p + q.$$

Or $S_{pq}(\lambda)$ est lui-même un polynôme de degré $p + q$ en e^λ : il est donc nécessaire que

$$S_{pq}(\lambda, t) = (e^\lambda - 1)^{p+q} s_{pq}(t).$$

$s_{pq}(t)$ ne dépend plus que du temps t et de la géométrie choisie : il correspond à la probabilité que, lorsque p et q particules sont initialement présentes dans les régions A et B respectivement, toutes les particules se retrouvent dans la région B au temps t .

Nous pouvons donc écrire

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \sum_{p=0}^{N_a} \sum_{q=0}^{N_b} s_{pq}(t) [\rho_a(e^\lambda - 1)]^p [\rho_b(e^{-\lambda} - 1)]^q = G_t(\alpha, \beta) \quad (5.4)$$

où $\alpha = \rho_a(e^\lambda - 1)$ et $\beta = \rho_b(e^{-\lambda} - 1)$: nous avons donc réduit la dépendance en $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ en une dépendance en (α, β) .

À partir de ceci, il est possible de parvenir à la dépendance en le seul paramètre ω en mettant à profit la symétrie "particules-trous" de l'exclusion symétrique. En effet, pour le SSEP (et non pour un ASEP, par exemple), les sites vides ("trous") suivent la même dynamique que les particules : ils diffusent avec un taux 1 vers les sites voisins, tout en respectant la règle d'exclusion.

Dans la situation de la figure 5.1, les trous ont pour densités initiales $1 - \rho_a$ dans la région A et $1 - \rho_b$ dans la région B : leur courant de A vers B au bout du temps t est $-Q_t$. La symétrie particules-trous impose donc que

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \langle e^{-\lambda Q_t} \rangle_{1-\rho_a, 1-\rho_b},$$

soit $G_t(\rho_a(e^\lambda - 1), \rho_b(e^{-\lambda} - 1)) = G_t((1 - \rho_a)(e^{-\lambda} - 1), (1 - \rho_b)(e^\lambda - 1))$, ou encore

$$G_t(\alpha, \beta) = G_t(e^{-\lambda} - 1 + \alpha e^{-\lambda}, e^\lambda - 1 + \beta e^\lambda). \quad (5.5)$$

Remarquons que cette relation n'est *a priori* valable que dans le domaine en (α, β) correspondant à des valeurs 'physiques' des paramètres $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$: les contraintes $\{\lambda \in \mathbb{R}, 0 \leq \rho_a \leq 1, 0 \leq \rho_b \leq 1\}$ correspondent à $\{\alpha \in \mathbb{R}, \beta \in \mathbb{R}, \alpha\beta \leq 0\}$. Toutefois, d'après (5.4), $G_t(\alpha, \beta)$ est un polynôme de degré (N_a, N_b) en (α, β) : par conséquent, la relation (5.5) se prolonge naturellement à tous $(\alpha, \beta, \lambda) \in \mathbb{C}^3$. Faisant le choix $e^{-\lambda} = 1 + \beta$, elle conduit à

$$G_t(\alpha, \beta) = G_t(\alpha + \beta + \alpha\beta, 0) = F_t(\omega),$$

avec $\omega = \alpha + \beta + \alpha\beta = \rho_a(e^\lambda - 1) + \rho_b(e^{-\lambda} - 1) + \rho_a\rho_b(e^\lambda - 1)(e^{-\lambda} - 1)$ le paramètre unique donné par (5). Comme $F_t(\omega) = G_t(\omega, 0)$, nous aboutissons donc au développement suivant :

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \sum_{n \geq 0} \omega^n s_n(t), \quad (5.6)$$

où $s_n(t)$ est la probabilité que n particules, toutes présentes dans la région A à l'instant 0, se retrouvent dans la région B à l'instant t . En considérant des segments de taille $2N$ de plus en plus grands, le développement (5.6) se généralise facilement à la ligne infinie : la dépendance en ω est conservée lors du passage à la limite $N \rightarrow \infty$, tandis que chacun des coefficients $s_n(t)$ croît vers une limite finie, que nous calculons analytiquement ci-dessous.

5.2 Fonctions de Bethe des probabilités de transition

Le développement (5.6) montre que la fonction génératrice du courant Q_t à travers l'origine d'un processus d'exclusion sur la ligne infinie peut s'exprimer comme une série en le seul paramètre ω (5). Les coefficients de ω^n , $s_n(t)$, est la probabilité que n particules, initialement à gauche de l'origine, se retrouvent toutes à droite de celle-ci au temps t : soit

$$s_n(t) = \sum_{\substack{E \subset A \\ |E|=n}} \sum_{\substack{F \subset B \\ |F|=n}} P_t^{(n)}[E \rightarrow F]$$

avec E l'ensemble de départ des n particules (inclus dans $A = \{..., -3, -2, -1\}$) et F leur ensemble d'arrivée (inclus dans $B = \{0, 1, 2, ...\}$).

Chaque terme de cette somme peut être calculé par ansatz de Bethe. $P_t^{(n)}[E \rightarrow F]$ est en effet une fonction de corrélation à n points des taux d'occupations au temps t :

$$P_t^{(n)}[E \rightarrow F] = \left\langle \prod_{j \in F} \tau_j(t) \right\rangle = \langle \tau_F(t) \rangle$$

pour une condition initiale constituée de n particules placées en E . Elle peut donc être exprimée par combinaison linéaire des fonctions d'onde de Bethe $\varphi_t(i_1, \dots, i_n, z_1, \dots, z_n)$ (2.4). Tracy et Widom [101] ont montré qu'elle prend la forme d'une intégrale de contours sur les z_k : pour $E = \{i_1, \dots, i_n\}$ et $F = \{j_1, \dots, j_n\}$, elle s'écrit

$$\begin{aligned} P_t^{(n)}[E \rightarrow F] &= \oint_{|z_k|=r} \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi z_k} z_k^{-i_k} \right] \varphi_t(j_1, \dots, j_n, z_1, \dots, z_n) \\ &= \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \oint_{|z_k|=r} \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi z_k} e^{t(z_k+1/z_k-2)} z_{\sigma(k)}^{j_k-i_{\sigma(k)}} \right] \left[\prod_{k < l} \frac{z_{\sigma(k)} z_{\sigma(l)} + 1 - 2z_{\sigma(k)}}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right], \end{aligned} \quad (5.7)$$

où l'intégrale sur chaque z_k se fait sur un contour entourant 0 de rayon $r \ll 1$ qui n'englobe au plus qu'un éventuel pôle en 0.

5.2.1 Expression déterminantale exacte

À partir de (5.7), il nous est possible de calculer exactement $s_n(t)$ en sommant $P_t^{(n)}[E \rightarrow F]$ sur tous les ensembles de départ et d'arrivée possibles :

$$s_n(t) = \sum_{i_1 < \dots < i_n \leq 0} \sum_{0 < j_1 < \dots < j_n} P_t^{(n)}[\{i_1, \dots, i_n\} \rightarrow \{j_1, \dots, j_n\}].$$

Ceci revient à sommer n séries géométriques en les z_k dans (5.7). Comme

$$\sum_{i_1 < \dots < i_n \leq 0} \prod_k z_k^{-i_k} = \frac{1}{z_1 \dots z_n} \left[\prod_{k=1}^n \frac{z_1 \dots z_k}{1 - z_1 \dots z_k} \right] \text{ et } \sum_{0 < j_1 < \dots < j_n} \prod_k z_{\sigma(k)}^{j_k} = \prod_{k=1}^n \frac{z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}}{1 - z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}},$$

nous obtenons

$$s_n(t) = \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{2i\pi z_k^2} \frac{z_1 \dots z_k}{1 - z_1 \dots z_k} \frac{z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}}{1 - z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}} \right] \left[\prod_{k < l} \frac{z_{\sigma(k)} z_{\sigma(l)} + 1 - 2z_{\sigma(k)}}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right]. \quad (5.8)$$

Une identité algébrique due à Tracy et Widom ([101], éq. (1.6)) permet de simplifier cette expression :

$$\sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \left[\prod_{k=1}^n \frac{z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}}{1 - z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}} \right] \left[\prod_{k < l} (z_{\sigma(k)} z_{\sigma(l)} + 1 - 2z_{\sigma(k)}) \right] = z_1 \dots z_n \frac{\prod_{k < l} (z_l - z_k)}{\prod_k (1 - z_k)}. \quad (5.9)$$

(5.9) permet d'éliminer la somme sur les permutations dans (5.8), conduisant à

$$s_n(t) = \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{2i\pi z_k (1 - z_k)} \frac{z_1 \dots z_k}{1 - z_1 \dots z_k} \right] \left[\prod_{k < l} \frac{z_l - z_k}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right].$$

Afin d'éliminer les $z_1 \dots z_k / 1 - z_1 \dots z_k$, nous cherchons à utiliser (5.9) à nouveau. Pour cela, nous pouvons changer les variables muettes z_k en z_{n-k} : soit

$$\begin{aligned} s_n(t) &= \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{2i\pi z_k (1 - z_k)} \frac{z_k \dots z_n}{1 - z_k \dots z_n} \right] \left[\prod_{k > l} \frac{z_l - z_k}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right] \\ &= \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{2i\pi z_k (1 - z_k)} \right] \frac{\prod_{k < l} (z_k - z_l)}{\prod_{k \neq l} (z_k z_l + 1 - 2z_k)} \\ &\quad \times \left[\prod_{k < l} (z_k z_l + 1 - 2z_k) \right] \left[\prod_{k=1}^n \frac{z_k \dots z_n}{1 - z_k \dots z_n} \right]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Il nous faut maintenant réintroduire une somme sur les permutations σ pour appliquer (5.9) : pour cela, nous remplaçons (5.10) par sa moyenne sur les permutations des z_k . Les termes de la première ligne de (5.10) sont antisymétriques sous permutation des z_k : ainsi

$$\begin{aligned} s_n(t) &= \frac{1}{n!} \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{2i\pi z_k (1 - z_k)} \right] \frac{\prod_{k < l} (z_k - z_l)}{\prod_{k \neq l} (z_k z_l + 1 - 2z_k)} \\ &\quad \times \left[\prod_{k < l} (z_{\sigma(k)} z_{\sigma(l)} + 1 - 2z_{\sigma(k)}) \right] \left[\prod_{k=1}^n \frac{z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}}{1 - z_{\sigma(k)} \dots z_{\sigma(n)}} \right] \\ &= \frac{1}{n!} \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{2i\pi (1 - z_k)^2} \right] \left[\prod_{k \neq l} \frac{z_k - z_l}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right]. \end{aligned}$$

Une nouvelle identité de Tracy et Widom ([100], éq. (7)), qui rappelle l'expression des déterminants de Vandermonde, nous permet d'exprimer cette dernière expression sous la forme d'un déterminant :

$$\left[\prod_{k=1}^n \frac{1}{(1 - z_k)^2} \right] \left[\prod_{k \neq l} \frac{z_k - z_l}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right] = \det \left(\frac{1}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right)_{1 \leq k, l \leq n}. \quad (5.11)$$

Ainsi, $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ (5.6) peut s'écrire

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \sum_{n \geq 0} \frac{\omega^n}{n!} \oint_{|z_k|=r} \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi} \right] \det \left(\frac{e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{z_k z_l + 1 - 2z_k} \right)_{1 \leq k, l \leq n}.$$

Cette forme correspond au développement du déterminant de Fredholm d'un opérateur fonctionnel. Soit K_t l'opérateur sur l'espace des fonctions continues sur le cercle de rayon r à valeurs complexes, $\mathcal{C}(C_r \rightarrow \mathbb{C})$, défini par :

$$K_t f(z) = \oint_{|z'|=r} \frac{dz'}{2i\pi} K_t(z, z') f(z') \text{ avec } K_t(z, z') = \frac{e^{t(z+1/z-2)}}{zz' + 1 - 2z}.$$

Alors

$$\begin{aligned} \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} &= \sum_{n \geq 0} \frac{\omega^n}{n!} \oint_{|z_k|=r} \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi} \right] \det(K_t(z_k, z_l))_{1 \leq k, l \leq n} \\ &= \det(I + \omega K_t). \end{aligned} \quad (5.12)$$

La fonction génératrice des moments de Q_t prend donc une forme particulièrement simple : comme nous le verrons ci-dessous, cette forme permet de déterminer facilement le comportement pour $t \rightarrow \infty$ de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$, et par conséquent celui des cumulants de Q_t .

5.2.2 Comportement asymptotique

L'expression déterminantale (5.12) permet de passer aisément de la fonction génératrice des moments de Q_t , $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle$, à la fonction génératrice de ses cumulants, $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$. En effet,

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \log \det(I + \omega K_t) = \text{tr} \log(I + \omega K_t) = - \sum_{n \geq 0} \frac{(-\omega)^n}{n} \text{tr} K_t^n.$$

Par conséquent, $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ se développe en puissances de ω comme une série d'intégrales de dimension n :

$$\begin{aligned} \log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} &= - \sum_{n \geq 1} \frac{(-\omega)^n}{n} \oint_{|z_k|=r} \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi} \right] K_t(z_1, z_2) \dots K_t(z_n, z_1) \\ &= - \sum_{n \geq 1} \frac{(-\omega)^n}{n} \oint_{|z_k|=r} \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi} \frac{e^{t(z_k+1/z_k-2)}}{z_k z_{k+1} + 1 - 2z_k} \right] \\ &= - \sum_{n \geq 1} \frac{(-\omega)^n}{n} I_n, \end{aligned} \quad (5.13)$$

en prenant pour convention $z_{n+1} \equiv z_1$ dans l'intégrale de dimension n .

Les intégrales de contours sur les z_k de (5.13) rendent l'analyse du comportement asymptotique de la fonction génératrice difficile. Il est toutefois possible de les transformer en intégrales sur des paramètres réels. En injectant dans A_n la relation

$$\frac{e^{t(z_{k+1}+1/z_k-2)}}{z_{k+1}+1/z_k-2} = \frac{1}{z_{k+1}+1/z_k-2} + \int_0^t dt_k e^{t_k(z_{k+1}+1/z_k-2)}$$

puis en développant le produit correspondant, nous obtenons

$$I_n = \sum_{E \subset \{1, \dots, n\}} \oint \left[\prod_{k=1}^n \frac{dz_k}{2i\pi z_k} \right] \left[\prod_{k \notin E} \frac{1}{z_{k+1}+1/z_k-2} \right] \left[\prod_{k \in E} \int_0^t dt_k e^{t_k(z_{k+1}+1/z_k-2)} \right].$$

Dans cette dernière expression, seul le terme $E = \{1, \dots, n\}$ est non nul ! En effet, supposons qu'il existe un indice $k \notin E$. L'intégrale sur z_k (les autres (z_l) et les (t_k) étant fixés) peut alors s'écrire

$$\begin{cases} \oint \frac{dz_k}{2i\pi z_k} \frac{e^{t_{k-1}z_k}}{z_{k+1}+1/z_k-2} & \text{si } k-1 \in E; \\ \oint \frac{dz_k}{2i\pi z_k} \frac{1}{(z_{k+1}+1/z_k-2)(z_k+1/z_{k-1}-2)} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Dans les deux cas, les pôles en z_k de cette intégrale ($\frac{1}{2-z_{k+1}}$ et éventuellement $2 - \frac{1}{z_{k-1}}$) sont en dehors du cercle de rayon $r \ll 1$ sur lequel porte l'intégrale : celle-ci vaut donc 0. Par conséquent,

$$I_n = \int_0^t \oint_{|z_k|=r} \frac{dt_k dz_k}{2i\pi z_k} e^{t_k(z_{k+1}+1/z_k-2)}.$$

Sous cette forme, il devient possible de changer les rayons des contours d'intégration des z_k sans rencontrer de pôles. Afin d'appliquer par la suite une méthode du col, nous choisissons $z_k = e^{i\theta_k} \sqrt{t_k/t_{k-1}}$, de telle sorte que

$$I_n = \int_0^t \int_{-\pi}^{\pi} \prod \frac{dt_k d\theta_k}{2\pi} e^{2\sqrt{t_{k-1}t_k}(\cos \theta_k - 1) - (\sqrt{t_k} - \sqrt{t_{k-1}})^2}. \quad (5.14)$$

À partir de cette expression, exacte à tout temps, il est facile de déterminer l'expression asymptotique de $\log \langle e^{\lambda Q t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$. Par méthode du col en $\theta_k \simeq 0$, (5.14) se simplifie en

$$I_n \simeq \int_0^t \prod_{k=1}^n \frac{dt_k}{2\sqrt{\pi} t_k} e^{-(\sqrt{t_k} - \sqrt{t_{k-1}})^2} = \left(\frac{t}{\pi}\right)^{n/2} \int_0^1 \prod d\alpha_k e^{-t(\alpha_k - \alpha_{k-1})^2}$$

en posant $t_k = t\alpha_k^2$. Finalement, l'intégrale sur $[0, 1]^n$ sur les α_k étant dominée pour t grand par la région $|\alpha_k - \alpha_l| \sim 1/\sqrt{t}$, elle peut être remplacée, dans cette limite, par une intégrale sur $[0, 1] \times \mathbb{R}^{n-1}$: ainsi,

$$I_n \simeq \left(\frac{t}{\pi}\right)^{n/2} \int_0^1 d\alpha_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha_2 \dots d\alpha_n e^{-t \sum (\alpha_k - \alpha_{k-1})^2} = \sqrt{\frac{t}{\pi n}}.$$

Nous arrivons donc à l'expression (4) de la fonction génératrice de Q_t à temps long pour le SSEP :

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} \simeq -\sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{n \geq 1} \frac{(-\omega)^n}{n^{3/2}} \quad (5.15)$$

$$\simeq \frac{\sqrt{t}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \log(1 + \omega e^{-k^2}). \quad (5.16)$$

Remarquons que la série (5.15) ne converge absolument que pour $|\omega| < 1$: elle coïncide alors avec la représentation (5.16), laquelle est définie pour tout $\omega \in \mathbb{C} \setminus \{-1, -2, \dots\} = \mathbb{C} \setminus \mathbb{N}^*$. Comme (5.15) s'obtient en prenant la limite terme à terme de (5.13) :

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = - \sum_{n \geq 1} \frac{(-\omega)^n}{n} I_n,$$

(5.15) n'est *a priori* valable que lorsque l'expression exacte converge absolument : de fait, comme nous pouvons montrer (en utilisant $\cos \theta \leq 1 - \frac{2}{\pi} \theta^2$ dans (5.14)) que

$$0 \leq I_n \leq \left(\frac{\pi}{2}\right)^{n/2} \sqrt{\frac{t}{\pi n}},$$

il suffit pour cela que $|\omega| < \sqrt{2/\pi}$.

Bien que cette validité de (5.15) dans un domaine limité soit suffisante pour calculer tous les cumulants de Q_t , les résultats présentés ci-dessous supposent que (5.16) est valable pour tout $\omega > -1$, y compris pour $\omega \rightarrow \infty$. Pour montrer ceci rigoureusement, il serait sans doute nécessaire d'étudier plus précisément la convergence des séries partielles de (5.13) vers le prolongement analytique (5.16).

5.3 Des fluctuations nettement non-gaussiennes

À partir de l'expression (5.16) de la fonction génératrice de Q_t , nous pouvons chercher à calculer sa fonction de grandes déviations. (5.16) suggère qu'elle prend la forme

$$\text{Pro} \left[\frac{Q_t}{\sqrt{t}} \simeq q \right] \sim e^{\sqrt{t} G(q)},$$

la fonction $G(q)$ se déduisant de (5.16) par transformée de Legendre. Celle-ci donne une expression paramétrique de $G(q)$, que nous avons calculée numériquement dans la figure 5.2 pour $|q| < 3/2$, dans les cas $\rho_a = \rho_b = 1/2$ et $\rho_a = 1, \rho_b = 0$.

Il reste toutefois possible de déterminer le comportement asymptotique de $G(q)$ pour de grandes fluctuations de courant, $q \rightarrow \pm\infty$. En effet, la représentation intégrale (5.16) de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ peut se développer, pour $\omega \rightarrow \infty$, sous la forme

$$\frac{1}{\sqrt{t}} \log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle \simeq \frac{4}{3\pi} [\log \omega]^{3/2} + \frac{\pi}{6} [\log \omega]^{-1/2} + \dots$$

Après transformée de Legendre, nous aboutissons à une expression asymptotique de $G(q)$ pour $q \rightarrow \pm\infty$:

$$G(q) \simeq -\frac{\pi^2}{12}|q|^3 + q \log \rho_a(1 - \rho_b) + \mathcal{O}(1). \quad (5.17)$$

Cette expression n'est valable que pour $\rho_a > 0$ et $\rho_b < 1$ pour $q > 0$, et pour $\rho_b > 0$ et $\rho_a < 1$ pour $q < 0$: en effet, pour des raisons évidentes,

$$\begin{cases} \text{Pro}[Q_t > 0] = 0 & \text{si } \rho_a = 0 \text{ ou } \rho_b = 1; \\ \text{Pro}[Q_t < 0] = 0 & \text{si } \rho_a = 1 \text{ ou } \rho_b = 0. \end{cases} \quad (5.18)$$

À l'exception de ces cas particuliers, la décroissance de la loi de Q_t ne dépend pas des densités initiales ρ_a et ρ_b , prenant la forme (6)

$$\text{Pro}[Q_t \simeq Q] \sim \exp \left[-\alpha \frac{|Q|^3}{t} \right] \text{ avec } \alpha = \frac{\pi^2}{12}.$$

Cette décroissance cubique de $G(q)$ se distingue nettement des lois gaussiennes observées pour un système à l'équilibre (3.5). La rapidité de cette décroissance explique la non-dépendance de α en les densités initiales ρ_a, ρ_b (hormis dans les cas de (5.18)) : le "prix à payer" pour faire passer un courant Q à travers l'origine est cubique en Q , alors que celui permettant de changer la condition initiale pour que Q sites à gauche de l'origine soient pleins et que Q sites à droite de l'origine soient vides n'est que linéaire en Q .

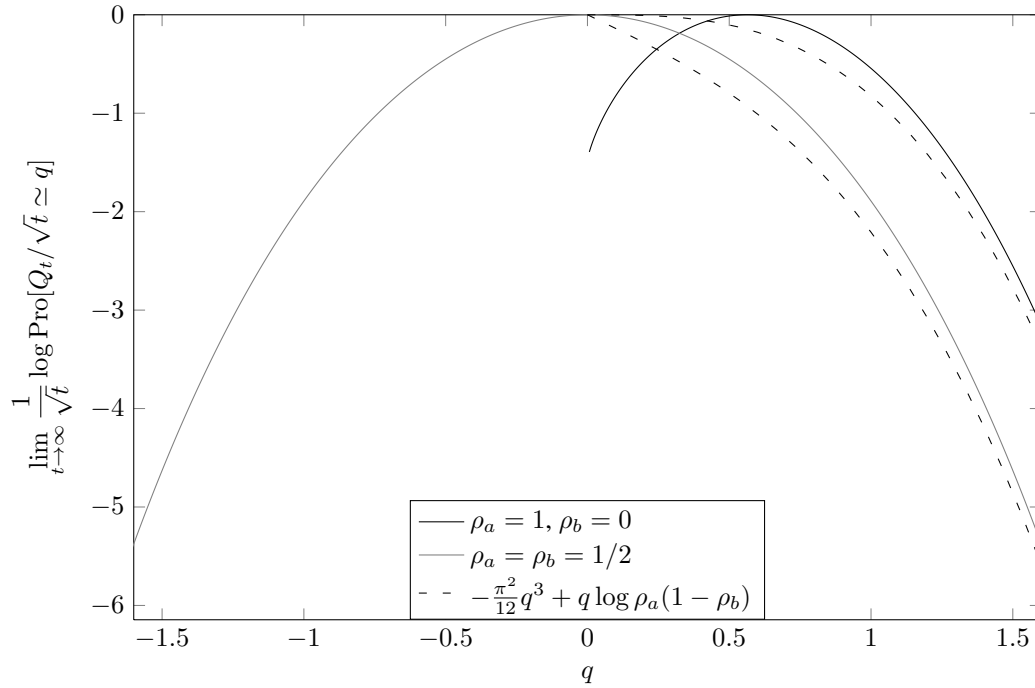


FIGURE 5.2 – Fonction de grande déviation rescalée $G(q)$ du courant Q_t pour un processus d'exclusion symétrique sur la ligne infinie, pour $\rho_A = 1, \rho_b = 0$ et pour $\rho_a = \rho_b = 1/2$. La fonction $G(q)$, qui peut être obtenue numériquement par transformée de Legendre à partir de la fonction génératrice $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ (4), se rapproche rapidement de son expression asymptotique pour $q \gg 1$ (5.17).

Systèmes diffusifs : résultats de l'approche macroscopique

6.1 Calcul variationnel de la fonction génératrice

Dans cette section, nous cherchons à calculer les fluctuations du courant Q_t d'un système diffusif considéré sur la géométrie infinie (fig. 1) à partir de la théorie macroscopique des fluctuations (voir 2.2).

La première étape de la théorie macroscopique des fluctuations consiste à définir, à partir des variables décrivant le comportement microscopique d'un système, des grandeurs "macroscopiques" auxquelles appliquer la théorie. Prenons l'exemple d'un gaz sur réseau discret : chaque site i de la ligne infinie \mathbb{Z} est décrit par son taux d'occupation $n_i(t) \geq 0$. Nous pouvons alors définir un profil de densité macroscopique, $\rho(x, \tau)$, obéissant à un scaling diffusif : pour un système de taille L , celui-ci prendrait la forme

$$\langle n_i(t) \rangle \simeq \rho\left(\frac{i}{L}, \frac{t}{L^2}\right).$$

Dans le cas présent d'une géométrie infinie, le système n'a pas d'échelle spatiale : à sa place, l'échelle pertinente est plutôt le temps t pendant lequel Q_t est mesuré, de telle sorte que le scaling diffusif prend la forme

$$\langle n_i(s) \rangle \simeq \rho\left(\frac{i}{\sqrt{t}}, \frac{s}{t}\right). \quad (6.1)$$

$\rho(x, \tau)$ étant conservé, son évolution est déterminée par un courant associé $j(x, \tau)$, tel que $\partial_x j + \partial_\tau \rho = 0$. Celui-ci est également relié aux courants traversant le système microscopique : par exemple, il est facile de voir que

$$Q_t = \sqrt{t} \int_0^1 j(0, \tau) d\tau. \quad (6.2)$$

Selon la théorie macroscopique des fluctuations, $\rho(x, \tau)$ suit une évolution stochastique, qui prend la forme d'une loi de Fick bruitée sur $j(x, \tau)$ (2.8) :

$$j(x, \tau) = -D(\rho) \partial_x \rho(x, \tau) + \frac{\sqrt{\sigma(\rho)}}{t^{1/4}} \eta(x, \tau), \quad (6.3)$$

où l'échelle $t^{1/4}$ remplace l'échelle spatiale \sqrt{L} de (2.8). Les coefficients $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$ sont liés aux coefficients de réponse et de fluctuations d'un système de taille L à un gradient de densité (voir fig. 2.1) ; ils sont reliés à l'énergie libre par site $f(\rho)$ du système microscopique par une relation de fluctuation-dissipation qui prend la forme (2.5)

$$f''(\rho) = \frac{2D(\rho)}{\sigma(\rho)}. \quad (6.4)$$

La théorie macroscopique des fluctuations proprement dite consiste à exprimer (6.3) sous la forme d'un principe de grandes déviations sur les différentes évolutions $(\rho(x, \tau), j(x, \tau))$, compatibles avec la loi de conservation $\partial_x j + \partial_\tau \rho = 0$, que le système peut adopter entre les temps 0 et t . Il se met sous la forme

$$\text{Pro}[\rho(x, \tau), j(x, \tau)] \sim \exp \left[-\sqrt{t} \int_0^1 d\tau \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{(j(x, \tau) + D(\rho(x, \tau))\partial_x \rho(x, \tau))^2}{2\sigma(\rho(x, \tau))} \right]. \quad (6.5)$$

À partir de celui-ci, nous pouvons exprimer la fonction génératrice du courant Q_t comme la solution d'un problème d'optimisation. Chaque évolution macroscopique $(\rho(x, \tau), j(x, \tau))$ produit un courant $Q_t = \sqrt{t} \int_0^1 j(0, \tau) d\tau$, mais possède un 'coût' probabiliste, en termes de grandes déviations, plus ou moins important, réparti entre l'évolution aux temps intermédiaires (6.5) et la production de la condition initiale $(\rho(x, 0), j(x, 0))$. À cause du choix de scaling (6.1), ce coût initial prend la forme

$$\text{Pro}[\rho(x, 0)] \sim \exp \left[-\sqrt{t} \mathcal{F}_0[\rho(x, 0)] \right], \quad (6.6)$$

où la 'fonction de grandes déviations du profil initial' \mathcal{F}_0 dépend du type de moyenne (recuite ou gelée) choisi. Les conditions initiales du système imposent que, à l'instant initial, la densité moyenne du système prenne la forme en créneau

$$r(x) = \begin{cases} \rho_a & \text{si } x < 0 ; \\ \rho_b & \text{si } x > 0 . \end{cases} \quad (6.7)$$

- dans le cas d'une moyenne recuite (4.1), il est permis au profil $\rho(x, 0)$ de varier. Le choix de ρ_a et de ρ_b détermine la loi de $\rho(x, 0)$: on peut montrer que

$$\mathcal{F}_0[\rho(x, 0)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx [f(\rho(x, 0)) - f(r(x)) - (\rho(x, 0) - r(x))f'(r(x))] , \quad (6.8)$$

avec $r(x)$ la fonction en créneau (6.7) et $f(\rho)$ l'énergie libre par site microscopique (6.4).

- dans le cas d'une moyenne gelée (4.2), la condition initiale n'est, au contraire, pas autorisée à fluctuer : le seul profil initial autorisé est $\rho(x, 0) = r(x)$, et $\mathcal{F}_0[\rho(x, 0)] = \mathcal{F}_0[r(x)]$ est nul.

Regroupant (6.2), (6.5) et (6.6), nous aboutissons à l'expression suivante de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ comme l'optimum d'un principe de grandes déviations,

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \sqrt{t} \times \max_{\rho, j} \left[\lambda \int_0^1 j(0, \tau) d\tau - \mathcal{F}_0[\rho(x, 0)] - \iint d\tau dx \frac{(j + D(\rho)\partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right], \quad (6.9)$$

où le maximum est pris sur tous les profils (ρ, j) satisfaisant l'équation de conservation $\partial_x j + \partial_\tau \rho = 0$ ainsi que, dans le cas gelé, la condition supplémentaire $\rho(x, 0) = r(x)$.

6.2 Renversement du temps et théorème des fluctuations

Le problème variationnel (6.9) permettant de calculer la fonction génératrice de Q_t possède, dans sa version recuite (6.8), une symétrie non triviale. Celle-ci consiste à effectuer un renversement du temps sur le système : le résultat obtenu est donc une sorte de théorème des fluctuations hors d'état stationnaire.

Pour mettre en évidence cette symétrie, considérons le terme croisé de l'intégrale du principe de grandes déviations (6.5) :

$$\iint dx d\tau \frac{(j + D(\rho)\partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} = \iint dx d\tau \frac{j^2 + (D(\rho)\partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} + \iint dx d\tau \frac{j D(\rho)\partial_x \rho}{\sigma(\rho)}.$$

À l'aide de la relation de fluctuation -dissipation (6.4) et de la relation de conservation $\partial_x j + \partial_\tau \rho = 0$, il est possible de l'écrire sous la forme d'un terme de bord aux temps 0 et 1. Tout d'abord,

$$\begin{aligned} \iint dx d\tau \frac{j D(\rho)\partial_x \rho}{\sigma(\rho)} &= \iint dx d\tau \frac{j f''(\rho)\partial_x \rho}{2} \\ &= \iint dx d\tau \frac{j \partial_x f'(\rho)}{2} \\ &= - \iint dx d\tau \frac{f'(\rho)\partial_x j}{2}, \end{aligned}$$

l'intégration par parties en x n'occasionnant pas de termes de bord puisque $j(x, \tau) \rightarrow 0$ et $f(\rho)$ reste borné lorsque $x \rightarrow \pm\infty$. Ainsi, en utilisant $\partial_x j = -\partial_\tau \rho$,

$$\iint dx d\tau \frac{j D(\rho)\partial_x \rho}{\sigma(\rho)} = \iint dx d\tau \frac{f'(\rho)\partial_\tau \rho}{2} = \frac{1}{2} \int dx [f(\rho(x, 1)) - f(\rho(x, 0))] . \quad (6.10)$$

Ce terme de bord peut être "absorbé" par les autres termes de (6.9). En effet, à partir de (6.8),

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int dx [f(\rho(x, 1)) - f(\rho(x, 0))] &= \frac{\mathcal{F}_0[\rho(x, 1)] - \mathcal{F}_0[\rho(x, 0)]}{2} \\ &\quad + \int dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)] \frac{f'(r(x))}{2}. \quad (6.11) \end{aligned}$$

Le dernier terme de cette expression peut s'intégrer au terme de comptage de courant de (6.9) : en effet,

$$\begin{aligned} \int dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)] \frac{f'(r(x))}{2} &= \iint dx d\tau \frac{\partial_\tau \rho f'(r(x))}{2} = - \iint dx d\tau \frac{\partial_x j f'(r(x))}{2} \\ &= \iint dx d\tau \frac{j \partial_x [f'(r(x))]}{2} \end{aligned}$$

$r(x)$ étant une fonction créneau (6.7), $\partial_x[f'(r(x))]$ est, à une constante multiplicative près, une fonction de Dirac $\delta(x)$: plus précisément,

$$\iint dx d\tau j \frac{\partial_x[f'(r(x))]}{2} = \iint dx d\tau j \frac{f'(\rho_b) - f'(\rho_a)}{2} \delta(x) = \left[\int_{\rho_a}^{\rho_b} \frac{D(q)}{\sigma(q)} dq \right] \left[\int d\tau j(0, \tau) \right] \quad (6.12)$$

à l'aide de (6.4). Remplaçant (6.10), (6.11) puis (6.12) dans (6.9), nous aboutissons à

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{t}} \log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle \simeq \max_{j, \rho} \left[-\frac{\mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) + \mathcal{F}_0(\rho(x, 1))}{2} - \iint dx d\tau \frac{j^2 + (D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right. \\ \left. + \left(\lambda - \int_{\rho_a}^{\rho_b} \frac{D(q) dq}{\sigma(q)} \right) \int_0^1 d\tau j(0, \tau) \right]. \quad (6.13) \end{aligned}$$

Dans cette expression de la fonction génératrice, il nous est plus facile d'étudier l'effet d'un renversement du temps

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) & \rightarrow & \rho(x, 1 - \tau) \\ j(x, \tau) & \rightarrow & -j(x, 1 - \tau) \end{cases} \quad (6.14)$$

Une telle transformation est incompatible avec les conditions aux bords correspondant à une mesure gelée de Q_t (4.2) : le profil final $\rho(x, 1)$ pouvant varier librement, il est impossible que le profil renversé $\rho(x, 1 - \tau)$ vérifie la condition aux bords initiale $\rho(x, 0) = r(x)$.

En revanche, les conditions aux bords de la moyenne recuite (4.1) laissent $\rho(x, 0)$ et $\rho(x, 1)$ tous deux libres. Il est donc possible de réaliser la transformation (6.14) : lors de celle-ci, les deux premiers termes de (6.13) restent inchangés. Pour que le dernier terme garde aussi sa valeur, il est nécessaire de changer λ en un λ' de manière à ce que le terme de comptage de courant de (6.13) reste inchangé, soit

$$\left(\lambda' - \int_{\rho_a}^{\rho_b} \frac{D(q) dq}{\sigma(q)} \right) = - \left(\lambda - \int_{\rho_a}^{\rho_b} \frac{D(q) dq}{\sigma(q)} \right).$$

Nous aboutissons donc au résultat suivant :

$$\log \langle e^{\lambda_1 Q_t} \rangle = \log \langle e^{\lambda_2 Q_t} \rangle \quad \text{si} \quad \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \int_{\rho_a}^{\rho_b} \frac{D(q) dq}{\sigma(q)}. \quad (6.15)$$

Remarquons que, dans le cas particulier de l'exclusion symétrique (2.6), pour lequel $D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$, cette relation prend la forme

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \log \frac{(1 - \rho_a)\rho_b}{\rho_a(1 - \rho_b)}.$$

Dans ce cas particulier, l'analyse microscopique du système montre que la fonction génératrice de Q_t ne dépend de $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ qu'à travers un unique paramètre ω (5). Or, les deux solutions de l'équation

$$\omega = \rho_a(e^\lambda - 1) + \rho_b(e^{-\lambda} - 1) + \rho_a \rho_b (e^\lambda - 1)(e^{-\lambda} - 1)$$

vérifient justement $e^{\lambda_1} e^{\lambda_2} = \frac{(1 - \rho_a)\rho_b}{\rho_a(1 - \rho_b)}$: ainsi, le théorème des fluctuations que nous obtenons ici pour tout système diffusif est, dans le cas du SSEP, une conséquence de l'invariance en ω .

6.3 Équations d'optimisation de l'action

6.3.1 Transformation de Martin-Siggia-Rose

Le problème d'optimisation permettant d'obtenir la fonction génératrice de Q_t (6.9) s'avère en pratique très difficile à résoudre, en particulier parce qu'il consiste en une optimisation sur des champs $\rho(x, \tau)$ et $j(x, \tau)$ couplés. Dans cette partie, nous effectuons sur le principe de grandes déviations (6.5) une transformation, dite de Martin-Siggia-Rose [26, 63, 85], qui permet de ramener ce problème d'optimisation à une optimisation sur deux champs indépendants. Ce formalisme a été introduit par Kurchan, Tailleur et Lecomte dans [99] et utilisé dans [62, 69].

Soit $P[\rho_0(x) \xrightarrow{t} \rho_1(x)]$ la probabilité que le champ de densité $\rho(x, \tau)$, égal à $\rho_0(x)$ au temps $\tau = 0$, évolue pour donner le profil $\rho_1(x)$ au temps $\tau = 1$ (c'est à dire au temps microscopique t). Le principe de grandes déviations (6.5) permet d'exprimer $P[\rho_0(x) \xrightarrow{t} \rho_1(x)]$ sous la forme d'une intégrale fonctionnelle :

$$P[\rho_0(x) \xrightarrow{t} \rho_1(x)] \propto \int \mathcal{D}[\rho] \mathcal{D}[j] \left[\prod_{x, \tau} \delta(\partial_x j + \partial_\tau \rho) \right] \exp \left[-\sqrt{t} \iint dx d\tau \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right], \quad (6.16)$$

où l'intégrale porte sur tous les champs $\rho(x, \tau)$ satisfaisant $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$ et $\rho(x, 1) = \rho_1(x)$ et sur tous les champs $j(x, \tau)$ possibles, la contrainte entre j et ρ ayant été prise en compte à l'aide d'un produit de fonctions de Dirac $\delta(\partial_x j + \partial_\tau \rho)$.

Chacun de ces δ peut être représenté sous une forme intégrale, à l'aide de

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2i\pi \xi x} d\xi = \int_{i\mathbb{R}} \frac{d\hat{\rho}}{2\pi} e^{-x\hat{\rho}}$$

En l'introduisant cette représentation en chaque poitin (x, τ) , nous aboutissons à une expression de (6.16) faisant intervenir un champ $\hat{\rho}(x, \tau)$ à valeurs dans $i\mathbb{R}$:

$$P[\rho_0(x) \xrightarrow{t} \rho_1(x)] \propto \int \mathcal{D}[\rho] \mathcal{D}[j] \mathcal{D}[\hat{\rho}] \exp \left[-\sqrt{t} \iint dx d\tau \left(\hat{\rho}(\partial_x j + \partial_\tau \rho) + \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right) \right].$$

Dans cette équation, nous pouvons intégrer par parties $\int dx \hat{\rho} \partial_x j$ sans termes de bords (puisque $j(x, \tau) \rightarrow 0$ pour $x \rightarrow \pm\infty$). Par conséquent,

$$P[\rho_0(x) \xrightarrow{t} \rho_1(x)] \propto \int \mathcal{D}[\rho] \mathcal{D}[j] \mathcal{D}[\hat{\rho}] \exp \left[-\sqrt{t} \iint dx d\tau \left(\hat{\rho} \partial_\tau \rho + D(\rho) (\partial_x \rho) (\partial_x \hat{\rho}) - \frac{\sigma(\rho)}{2} (\partial_x \hat{\rho})^2 + \frac{(j + D(\rho) \partial_x \rho - \sigma(\rho) \partial_x \hat{\rho})^2}{2\sigma(\rho)} \right) \right]. \quad (6.17)$$

Sous cette forme, il devient possible d'effectuer l'intégrale (gaussienne) sur le champ j : son élimination donne

$$P[\rho_0(x) \xrightarrow{t} \rho_1(x)] \propto \int \mathcal{D}[\rho] \mathcal{D}[\hat{\rho}] \exp \left[-\sqrt{t} \iint dx d\tau \left(\hat{\rho} \partial_\tau \rho + D(\rho) (\partial_x \rho) (\partial_x \hat{\rho}) - \frac{\sigma(\rho)}{2} (\partial_x \hat{\rho})^2 \right) \right].$$

Dans cette expression, l'intégration sur $\hat{\rho}(x, \tau)$, qui doit *a priori* être faite sur $i\mathbb{R}$, peut se ramener à une intégration sur \mathbb{R} en utilisant le fait que l'argument de l'exponentielle ci-dessus décroît bien pour $|\hat{\rho}| \rightarrow \infty$ si $0 \leq \arg \hat{\rho} \leq \frac{\pi}{2}$ ou $\pi \leq \arg \hat{\rho} \leq \frac{3\pi}{2}$.

À partir de ce nouveau principe de grandes déviations, nous pouvons modifier le problème d'optimisation (6.9) dont est solution $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ pour qu'il porte sur les champs indépendants $(\rho, \hat{\rho})$ au lieu de (ρ, j) : exprimant le terme de comptage de courant comme $\lambda \int_0^\infty dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)]$ au lieu de $\lambda \int_0^1 j(0, \tau) d\tau$, nous pouvons écrire

$$\frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle}{\sqrt{t}} \simeq \max_{\rho, \hat{\rho}} \left[\lambda \int_0^\infty dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)] - \mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) - \iint dx d\tau \left(\hat{\rho} \partial_\tau \rho + D(\rho)(\partial_x \rho)(\partial_x \hat{\rho}) - \frac{\sigma(\rho)}{2} (\partial_x \hat{\rho})^2 \right) \right]. \quad (6.18)$$

Nous pouvons maintenant obtenir les équations d'optimisation satisfaites par ρ et $\hat{\rho}$ en considérant l'effet de faibles variations (indépendantes) de ces deux champs :

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) \rightarrow \rho(x, \tau) + \delta \rho(x, \tau) \\ \hat{\rho}(x, \tau) \rightarrow \hat{\rho}(x, \tau) + \delta \hat{\rho}(x, \tau) \end{cases}.$$

Après quelques intégrations par parties en x , nous aboutissons à

$$\begin{aligned} 0 = & \int dx \delta \rho(x, 0) \left[-\frac{\delta \mathcal{F}_0}{\delta \rho(x, 0)} - \lambda \theta(x) + \hat{\rho}(x, 0) \right] + \int dx \delta \rho(x, 1) [\lambda \theta(x) - \hat{\rho}(x, 1)] \\ & + \iint dx d\tau \delta \hat{\rho}(x, \tau) (-\partial_\tau \rho + \partial_x [D(\rho) \partial_x \rho - \sigma(\rho) \partial_x \hat{\rho}]) \\ & + \iint dx d\tau \delta \rho(x, \tau) \left(\partial_\tau \hat{\rho} + D(\rho) \partial_x^2 \hat{\rho} + \frac{\sigma'(\rho)}{2} (\partial_x \hat{\rho})^2 \right) \end{aligned}$$

avec $\theta(x)$ la fonction de Heaviside. Ainsi, les champs $\rho(x, \tau)$ et $\hat{\rho}(x, \tau)$ obéissent aux équations

$$\begin{cases} \partial_\tau \rho &= \partial_x (D(\rho) \partial_x \rho - \sigma(\rho) \partial_x \hat{\rho}) \\ \partial_\tau \hat{\rho} &= -D(\rho) \partial_x^2 \hat{\rho} - \sigma'(\rho) (\partial_x \hat{\rho})^2 / 2. \end{cases} \quad (6.19)$$

La première de ces équations n'est autre que l'équation de conservation $\partial_x j + \partial_\tau \rho = 0$, puisque la valeur optimale de j dans (6.17) était

$$j = -D(\rho) \partial_x \rho + \sigma(\rho) \partial_x \hat{\rho};$$

nous obtenons également les conditions au bord satisfaites par $\hat{\rho}$, sous la forme

$$\begin{cases} \hat{\rho}(x, 1) &= \lambda \theta(x) \\ \hat{\rho}(x, 0) &= \lambda \theta(x) + f'(\rho(x, 0)) - f'(r(x)), \end{cases} \quad (6.20)$$

en utilisant l'expression (6.8) de \mathcal{F}_0 . Remarquons que la seconde de ces équations ne doit être satisfaite que si $\rho(x, 0)$ peut varier, c'est à dire si la mesure de $\langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ est recuite

(4.1) ; si, au contraire, nous considérons la moyenne gelée (4.2), alors (6.20) est remplacé par

$$\begin{cases} \hat{\rho}(x, 1) &= \lambda\theta(x) \\ \rho(x, 0) &= r(x). \end{cases} \quad (6.21)$$

L'expression (6.18) de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ peut se simplifier en utilisant ces équations d'optimisation : en remplaçant $\partial_\tau \rho$ par son expression (6.19) dans (6.18) et en intégrant par parties en x , il vient

$$\frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle}{\sqrt{t}} \simeq \lambda \int_0^\infty dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)] - \mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) - \iint dx d\tau \frac{\sigma(\rho)}{2} (\partial_x \hat{\rho})^2. \quad (6.22)$$

6.3.2 Résolution exacte en l'absence d'interactions

À priori, la détermination de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ à partir de la théorie macroscopique des fluctuations nécessite de résoudre le système d'équations aux dérivées partielles couplées (6.19) pour les conditions aux bords recuites (6.20) ou gelées (6.21), puis d'intégrer les solutions obtenues pour calculer (6.22). En pratique, nous ne savons pas résoudre ces équations lorsque $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$ sont quelconques, ni même dans le cas de l'exclusion symétrique, pour lequel $D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$.

En revanche, une simplification se produit lorsque l'on considère le cas du modèle ZRP simple (voir fig. 1.1), dans lequel les particules n'interagissent pas : pour ce modèle, $D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho) = 2\rho$, de telle sorte que l'équation d'optimisation satisfaite par $\hat{\rho}(x, \tau)$ se découple de $\rho(x, \tau)$: elle s'écrit en effet

$$\partial_\tau \hat{\rho} = -\partial_x^2 \hat{\rho} - (\partial_x \hat{\rho})^2.$$

Posant $\hat{\rho}(x, \tau) = \log F(x, \tau)$, cette équation devient

$$\partial_\tau F = -\partial_x^2 F;$$

$F(x, \tau)$ est donc *antidiffusive*. La condition au bord en $\tau = 1$, $\hat{\rho}(x, 1) = \lambda\theta(x)$, étant la même dans le cas recuit (6.20) et dans le cas gelé (6.21), l'expression de $F(x, \tau)$ est aussi la même dans les deux cas : elle prend la forme

$$F(x, \tau) = \frac{e^\lambda + 1}{2} + \frac{e^\lambda - 1}{2} E\left(\frac{x}{2\sqrt{1 - \tau}}\right), \quad (6.23)$$

où $E(z)$ est la fonction erreur :

$$E(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-u^2} du.$$

L'équation sur $\rho(x, \tau)$ de (6.19) se simplifie également pour le ZRP. Posant $\rho(x, \tau) = F(x, \tau)G(x, \tau)$, elle devient

$$\partial_\tau G = \partial_x^2 G.$$

$G(x, \tau)$ est donc diffusive. Elle est déterminée par la condition au bord à l'instant initial $\tau = 0$, qui dépend du type de moyenne considéré. Dans le cas recuit, cette condition au bord (6.20) prend, pour le ZRP, la forme

$$\hat{\rho}(x, 0) = \lambda\theta(x) + \log \frac{\rho(x, 0)}{r(x)} \text{ soit } G^{(r)}(x, 0) = r(x)e^{-\lambda\theta(x)}. \quad (6.24)$$

En revanche, dans le cas gelé, la condition au bord en $\tau = 0$ est $\rho(x, 0) = r(x)$, soit

$$G^{(g)}(x, 0) = r(x)/F(x, 0). \quad (6.25)$$

Il n'est pas nécessaire, pour calculer la fonction génératrice (6.22), de calculer $G(x, \tau)$. En effet, dans le cas du ZRP, les équations d'optimisation (6.19) permettent de montrer que

$$\frac{\sigma(\rho)}{2}(\partial_x \hat{\rho})^2 = \rho(\partial_x \hat{\rho})^2 = \partial_\tau(\rho \hat{\rho}) - \partial_x[\hat{\rho} \partial_x \rho - \rho \partial_x \hat{\rho} - 2\rho \hat{\rho} \partial_x \hat{\rho}].$$

Ainsi, (6.22) n'a que des termes de bord : soit

$$\begin{aligned} \frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle}{\sqrt{t}} &\simeq \lambda \int_0^\infty dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)] - \mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) - \int dx [\rho(x, \tau) \hat{\rho}(x, \tau)]_0^1 \\ &\simeq \int dx [\rho(x, \tau)(\lambda\theta(x) - \hat{\rho}(x, \tau))]_0^1 - \mathcal{F}_0(\rho(x, 0)). \end{aligned}$$

La partie en $\tau = 1$ du premier terme ci-dessus est nulle à la fois dans le cas recuit et dans le cas gelé, car la condition au bord en $\tau = 1$ est $\hat{\rho}(x, 1) = \lambda\theta(x)$. Utilisant $\hat{\rho}(x, 0) = \lambda\theta(x) + f'(\rho(x, 0)) - f'(r(x))$ dans le cas recuit et $\rho(x, 0) = r(x)$ dans le cas gelé, ainsi que $f(\rho) = \rho \log \rho - \rho$, nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned} \frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle^{(r)}}{\sqrt{t}} &\simeq \int dx [\rho(x, 0) - r(x)]; \\ \frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle^{(g)}}{\sqrt{t}} &\simeq \int dx [\lambda\theta(x) - \hat{\rho}(x, 0)]r(x). \end{aligned}$$

À l'aide de (6.23), de (6.24) et de (6.25), ces intégrales peuvent être calculées :

$$\frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle^{(r)}}{\sqrt{t}} \simeq \frac{\rho_a(e^\lambda - 1) + \rho_b(e^{-\lambda} - 1)}{\sqrt{\pi}}; \quad (6.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle^{(g)}}{\sqrt{t}} &\simeq \rho_a \int_{-\infty}^0 dx \log \left[\frac{e^\lambda + 1}{2} + \frac{e^\lambda - 1}{2} E\left(\frac{x}{2}\right) \right] \\ &\quad + \rho_b \int_0^\infty dx \log \left[\frac{e^{-\lambda} + 1}{2} + \frac{1 - e^{-\lambda}}{2} E\left(\frac{x}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6.27)$$

La différence entre les cas recuit et gelé est donc manifeste. Elle se traduit jusque dans le comportement asymptotique de ces fonctions génératrices : en effet, pour $\lambda \rightarrow \infty$,

$$\frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle^{(r)}}{\sqrt{t}} \underset{\lambda \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{\rho_a e^\lambda}{\sqrt{\pi}} \text{ tandis que } \frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle^{(g)}}{\sqrt{t}} \underset{\lambda \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{4}{3} \rho_a \lambda^{3/2}.$$

Après transformation de Legendre, nous pouvons en déduire la décroissance de la loi de Q_t dans les deux cas :

$$\log \text{Pro}[Q_t \simeq Q] \underset{Q \rightarrow \infty}{\propto} \begin{cases} -Q \left(\log \sqrt{\frac{\pi}{t}} \frac{Q}{\rho_a} - 1 \right) & \text{dans le cas recuit ;} \\ -\frac{Q^3}{12t\rho_a^2} & \text{dans le cas gelé.} \end{cases} \quad (6.28)$$

La loi de Q_t présente donc une décroissance cubique dans le cas gelé, qui rappelle celle observée pour l'exclusion symétrique à partir de calculs microscopiques ; en revanche, cette décroissance est beaucoup plus lente (presque linéaire) dans le cas recuit. Qualitativement, les configurations qui contribuent à $\text{Pro}[Q_t \simeq Q]$ dans le cas recuit sont celles où un nombre Q de particules est présent près de l'origine dès l'état initial : le "coût" d'une telle configuration initiale n'est que linéaire en Q , et celui de faire franchir l'origine à ces Q particules l'est également.

En revanche, dans le cas gelé, il faut "déplacer" toutes les particules d'un segment de longueur Q/ρ_a pour obtenir un grand courant Q , ce dont le coût est cubique en Q (comme dans le cas de l'exclusion symétrique). Dans la section 6.5, nous utiliserons cette propriété pour généraliser la décroissance cubique à une plus large gamme de systèmes.

6.4 Une généralisation de l'invariance de la fonction génératrice

Dans le cas particulier de l'exclusion symétrique (2.6) ($D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$), le raisonnement microscopique de la section 5.1 permet de montrer que la fonction génératrice $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ ne dépend, dans le cas d'une mesure recuite (4.1), des paramètres $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ qu'à travers un unique paramètre (5)

$$\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b) = \rho_a(e^\lambda - 1) + \rho_b(e^{-\lambda} - 1) + \rho_a \rho_b (e^\lambda - 1)(e^{-\lambda} - 1).$$

Dans cette section, nous cherchons à retrouver cette invariance à partir de la théorie macroscopique des fluctuations (6.9). Pour cela, nous prenons pour point de départ la formulation (6.18) de ce problème d'optimisation en terme de deux champs $\rho(x, \tau)$ et $\hat{\rho}(x, \tau)$ indépendants : soit, dans le cas du SSEP,

$$\frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle}{\sqrt{t}} \simeq \max_{\rho, \hat{\rho}} \left[\lambda \int_0^\infty dx [\rho(x, 1) - \rho(x, 0)] - \mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) - \iint dx d\tau (\hat{\rho} \partial_\tau \rho + (\partial_x \rho)(\partial_x \hat{\rho}) - \rho(1 - \rho)(\partial_x \hat{\rho})^2) \right]. \quad (6.29)$$

Tailleur, Kurchan et Lecomte [99] ont introduit, pour un processus d'exclusion en géométrie ouverte, une représentation de $(\rho, \hat{\rho})$ en termes de spins permettant de mettre l'action ci-dessus sous une forme symétrique. Posons

$$\begin{cases} S_+ = \rho e^{-\hat{\rho}} \\ S_- = (1 - \rho) e^{\hat{\rho}} \text{ ainsi que } \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{1}{2}(S_+^{(1)} S_-^{(2)} + S_-^{(1)} S_+^{(2)}) + S_z^{(1)} S_z^{(2)} \\ S_z = \rho - 1/2 \end{cases} \quad (6.30)$$

Alors la deuxième ligne de (6.29) s'écrit

$$- \iint dx d\tau \left(\hat{\rho} \partial_\tau \rho + (\partial_x \vec{S}) \cdot (\partial_x \vec{S}) \right).$$

Le dernier terme de cette "action" est isotrope : il n'est pas modifié si \vec{S} subit une transformation orthogonale par rapport au produit scalaire (6.30). Ainsi, la transformation correspondante sur les profils, $(\rho, \hat{\rho}) \rightarrow (\rho', \hat{\rho}')$, préserve les équations aux dérivées partielles (6.19) : nous pouvons donc penser que, si les profils de départ $(\rho, \hat{\rho})$ sont optimaux pour un choix des paramètres $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$, alors les profils $(\rho', \hat{\rho}')$ peuvent l'être pour un autre jeu de paramètres $(\lambda', \rho'_a, \rho'_b)$.

Raisonnons tout d'abord en termes de conditions nécessaires. Les conditions aux bords (6.20) imposent que les profils $(\rho, \hat{\rho})$ optimaux pour $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ satisfassent

$$\begin{cases} \rho(-\infty, \tau) = \rho_a \\ \hat{\rho}(-\infty, \tau) = 0 \end{cases} \text{ ainsi que } \begin{cases} \rho(+\infty, \tau) = \rho_b \\ \hat{\rho}(+\infty, \tau) = \lambda \end{cases}.$$

qui correspondent, en termes du spin \vec{S} , à

$$\vec{S}(-\infty, \tau) \equiv \vec{S}_{-\infty} = \begin{pmatrix} \rho_a \\ 1 - \rho_a \\ \rho_a - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{ et } \vec{S}(+\infty, \tau) \equiv \vec{S}_{+\infty} = \begin{pmatrix} \rho_b e^{-\lambda} \\ (1 - \rho_b) e^\lambda \\ \rho_b - \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Toute transformation orthogonale de \vec{S} devant conserver le produit scalaire, il est nécessaire que $\vec{S}_{-\infty} \cdot \vec{S}_{+\infty} = \vec{S}'_{-\infty} \cdot \vec{S}'_{+\infty}$. Or

$$\vec{S}_{-\infty} \cdot \vec{S}_{+\infty} = \frac{1}{2} (\rho_a (1 - \rho_b) e^\lambda + \rho_b e^{-\lambda} (1 - \rho_a)) + \left(\rho_a - \frac{1}{2} \right) \left(\rho_b - \frac{1}{2} \right) = \frac{\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)}{2} + \frac{1}{4}.$$

Ainsi, pour que les profils transformés $(\rho', \hat{\rho}')$ soient optimaux pour le choix de paramètres $(\lambda', \rho'_a, \rho'_b)$, il est nécessaire que $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b) = \omega(\lambda', \rho'_a, \rho'_b)$: l'invariance en ω refait donc son apparition.

Nous cherchons donc à montrer que les profils optimaux sont bien reliés (et les fonctions génératrices de Q_t sont égales) lorsque $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b) = \omega(\lambda', \rho'_a, \rho'_b)$. Il nous suffit pour cela d'étudier un cas particulier : celui d'une transformation $(\tilde{\lambda}, 1/2, 1/2) \rightarrow (\lambda, \rho_a, \rho_b)$, où $\tilde{\lambda}$ est choisi de telle sorte que $\omega(\tilde{\lambda}, 1/2, 1/2) = \omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)$. Pour simplifier les expressions qui vont suivre, nous paramétrisons ρ_a et ρ_b en termes de deux variables u et v de la manière suivante :

$$\rho_a = \frac{e^v \operatorname{ch} u - 1}{e^\lambda - 1} \text{ et } \rho_b = \frac{e^{-v} \operatorname{sh} u - 1}{e^{-\lambda} - 1}$$

de telle sorte que $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b) = \operatorname{sh}^2 u$ et $\tilde{\lambda} = 2u$. Il est alors possible d'exprimer explicitement les profils $(\rho, \hat{\rho})$ obtenus après transformation en fonction des profils $(\mu, \hat{\mu})$ optimaux pour $(\tilde{\lambda}, 1/2, 1/2)$:

$$\begin{cases} \rho = \frac{1}{\operatorname{sh} u \operatorname{sh} \frac{\tilde{\lambda}}{2}} \left(e^{\hat{\mu}-u} \operatorname{sh} \frac{\lambda+u-v}{2} - \operatorname{sh} \frac{\lambda-u-v}{2} \right) \left(\mu e^{u-\hat{\mu}} \operatorname{sh} \frac{u+v}{2} - (1-\mu) \operatorname{sh} \frac{u-v}{2} \right) \\ e^{\hat{\rho}} = 1 + \frac{e^u (e^\lambda - 1) (e^{\hat{\mu}} - 1)}{e^{\hat{\mu}} (e^u - e^v) (e^{u+v} - 1)}. \end{cases} \quad (6.31)$$

À partir de l'expression de $e^{\hat{\rho}}$, il est facile de voir que $\hat{\mu}$ vérifie la condition au bord à $\tau = 1$ (6.20) si et seulement si $\hat{\rho}$ la vérifie aussi :

$$\hat{\mu}(x, 1) = \tilde{\lambda}\theta(x) \Leftrightarrow \hat{\rho}(x, 1) = \lambda\theta(x). \quad (6.32)$$

L'étude de la condition au bord à $\tau = 0$ permet de se convaincre que la transformation (6.31) n'est pas compatible avec les conditions aux bords du cas gelé. En effet, celles-ci laissent $\hat{\mu}(x, 0)$ et $\hat{\rho}(x, 0)$ libres tout en imposant $\rho(x, 0) = r(x)$ et $\mu(x, 0) = 1/2$: or, d'après (6.31), les conditions aux bords gelées sur $(\mu, \hat{\mu})$ conduisent à un profil $\rho(x, 0)$ variable. Ainsi, il est *a priori* impossible de garantir que la transformation (6.31) permet de relier des optima du problème gelé.

En revanche, la condition au bord à $\tau = 0$ du problème recuit (6.20) est $\hat{\mu}(x, 0) = \tilde{\lambda}\theta(x) + f'(\mu(x, 0)) - f'(1/2)$. Pour l'exclusion symétrique, l'intégration de la relation de fluctuation-dissipation (6.4) permet de calculer l'entropie par site $f(r)$:

$$f'(r) = \log \frac{r}{1-r} \text{ puis } f(r) = r \log r + (1-r) \log(1-r).$$

Or, nous pouvons vérifier à partir de (6.31) que

$$\hat{\mu}(x, 0) = \tilde{\lambda}\theta(x) + \log \frac{\mu(x, 0)}{1-\mu(x, 0)} \Leftrightarrow \hat{\rho}(x, 0) = \lambda\theta(x) + \log \frac{\rho(x, 0)}{1-\rho(x, 0)} - \log \frac{r(x)}{1-r(x)}. \quad (6.33)$$

Ainsi, dans le cas recuit, si la condition au bord à $\tau = 0$ est vérifiée par $(\mu, \hat{\mu})$, alors elle l'est également par $(\rho, \hat{\rho})$.

Finalement, à partir des expressions (6.31), il est possible de montrer (après calculs) que les équations aux dérivées partielles (6.19) sont vérifiées par $(\rho, \hat{\rho})$ si elles le sont par $(\mu, \hat{\mu})$: par conséquent, si les profils $(\mu, \hat{\mu})$ sont optimaux dans (6.29) pour le choix de paramètres $(\tilde{\lambda}, 1/2, 1/2)$, alors les profils $(\rho, \hat{\rho})$ définis par (6.31) sont bien solutions du même problème d'optimisation pour $(\lambda, \rho_a, \rho_b)$.

Nous pouvons donc comparer directement les fonctions génératrices $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$ obtenues en intégrant les profils $(\mu, \hat{\mu})$ et $(\rho, \hat{\rho})$ dans (6.29). À cause de l'orthogonalité de la transformation en \vec{S} , leur différence s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}}{\sqrt{t}} - \frac{\log \langle e^{\tilde{\lambda} Q_t} \rangle_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}}{\sqrt{t}} &= \int_0^\infty dx \left[\lambda(\rho(x, 1) - \rho(x, 0)) - \tilde{\lambda}(\mu(x, 1) - \mu(x, 0)) \right] \\ &\quad - \mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) + \mathcal{F}_0(\mu(x, 0)) - \iint dx d\tau [\hat{\rho} \partial_\tau \rho - \hat{\mu} \partial_\tau \mu]. \end{aligned}$$

En intégrant par parties $\int d\tau [\hat{\rho} \partial_\tau \rho - \hat{\mu} \partial_\tau \mu]$ et en utilisant les conditions aux bords en $\tau = 0, 1$, cette différence se ramène à

$$\int dx \log \frac{1-r(x)}{1-\rho(x, 0)} \frac{1-\mu(x, 0)}{1-\frac{1}{2}} + \iint dx d\tau [\rho \partial_\tau \hat{\rho} - \mu \partial_\tau \hat{\mu}].$$

À partir de (6.31), la différence $[\rho \partial_\tau \hat{\rho} - \mu \partial_\tau \hat{\mu}]$ peut se mettre sous la forme d'une différentielle totale :

$$\rho \partial_\tau \hat{\rho} - \mu \partial_\tau \hat{\mu} = -\frac{\partial}{\partial \tau} \log [(e^u - e^v) e^{\hat{\mu}} + e^u (e^{u+v} - 1)].$$

Or, en utilisant les conditions aux bords (6.33) et (6.32), ainsi que les expressions (6.31), il est possible de montrer que

$$\frac{(e^u - e^v)e^{\hat{\mu}(x,1)} + e^u(e^{u+v} - 1)}{(e^u - e^v)e^{\hat{\mu}(x,0)} + e^u(e^{u+v} - 1)} = \frac{1 - r(x)}{1 - \rho(x, 0)} \frac{1 - \mu(x, 0)}{1 - \frac{1}{2}};$$

nous obtenons donc

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \log \langle e^{\tilde{\lambda} Q_t} \rangle_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}.$$

Nous avons donc retrouvé, à partir de l'approche macroscopique, l'invariance en ω prédite par des considérations microscopiques dans la section 5.1.

Il nous est maintenant possible de généraliser cette invariance : plus précisément, nous pouvons considérer un système diffusif pour lequel $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$ prendraient la forme

$$\begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2A\rho(B - \rho). \end{cases} \quad (6.34)$$

Lorsque $A > 0$ et $B > 0$, la fonction génératrice de Q_t dans ce système peut être aisément reliée à celle d'un processus d'exclusion : en effet, dans (6.9), le changement de variables

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) \rightarrow \rho(x, \tau)/B \\ j(x, \tau) \rightarrow j(x, \tau)/B \end{cases}$$

permet de montrer que

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \frac{1}{A} \log \langle e^{AB\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a/B, \rho_b/B}^{(\text{SSEP})},$$

puisque, d'après (6.4), $\mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) = \frac{1}{A} \mathcal{F}_0^{(\text{SSEP})}(\rho(x, 0)/B)$. Cette correspondance est valable à la fois dans les cas gelé et recuit : dans ce dernier cas, notre connaissance de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle$, obtenue par l'approche microscopique (5.16), conduit à

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b} = \frac{\sqrt{t}}{\pi A} \int_{-\infty}^{\infty} dk \log(1 + \omega_{A,B} e^{-k^2}) \quad (6.35)$$

avec

$$\omega_{A,B}(\lambda, \rho_a, \rho_b) = \frac{\rho_a(e^{AB\lambda} - 1)}{B} + \frac{\rho_b(e^{-AB\lambda} - 1)}{B} + \frac{\rho_a \rho_b (e^{AB\lambda} - 1)(e^{-AB\lambda} - 1)}{B^2}. \quad (6.36)$$

Deux cas présentent un intérêt particulier :

- lorsque $A = 1/B \rightarrow 0$, nous pouvons obtenir, par continuité de (6.35), l'expression de $\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ dans un système pour lequel $D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho) = 2\rho$, qui n'est autre que le ZRP simple. Pour ce modèle, sans interactions, nous avons calculé exactement les fonctions génératrices dans les cas recuit (6.26) et gelé (6.27) : nous pouvons alors bien vérifier que (6.35) donne le même résultat que (6.26).
- nous pouvons faire converger $\sigma(\rho)$ vers sa valeur $\sigma(\rho) = 4\rho^2$ pour le modèle de Kipnis- Marchiorio-Presutti (voir fig 1.3) en faisant $A \rightarrow -2$ et $B \rightarrow 0$. Cette valeur de A n'étant pas physique, il n'est pas garanti dans ce cas que (6.35) soit vérifiée ; en revanche, la dépendance en un paramètre (6.36) devrait rester valable, soit

$$\log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle_{\rho_a, \rho_b}^{(\text{KMP})} = F_t(\omega_{KMP})$$

avec $\omega_{KMP}(\lambda, \rho_a, \rho_b) = 4\rho_a \rho_b \lambda^2 - 2\lambda(\rho_a + \rho_b)$.

6.5 Encadrement de la décroissance non-gaussienne des fluctuations

Une des caractéristiques remarquables de la distribution de Q_t que nous avons calculée exactement dans le cas de l'exclusion symétrique (section 5.2.1) est sa décroissance cubique pour les valeurs extrêmes de Q_t (section 5.2.2) :

$$\text{Pro}[Q_t \simeq q\sqrt{t}]^{(\text{SSEP})} \underset{q \rightarrow \infty}{\propto} \exp \left[-\alpha \sqrt{t} q^3 \right] \text{ avec } \alpha = \frac{\pi^2}{12}. \quad (6.37)$$

Dans cette section, nous cherchons, à partir de la théorie macroscopique des fluctuations, à généraliser cette décroissance à d'autres systèmes diffusifs, caractérisés par leurs fonctions $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$ (6.3). Le résultat auquel nous sommes parvenus est le suivant : lorsque

$$\begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) \leq 2(\rho + c) & \text{pour } 0 \leq \rho \leq R; \\ \sigma(\rho) = 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

la probabilité $\text{Pro}[Q_t \simeq \sqrt{t}q]$ est encadrée, pour $q \rightarrow \infty$, de la manière suivante :

$$-\frac{q^3}{2\rho_a\sigma(\rho_a)} \leq \frac{1}{\sqrt{t}} \log \text{Pro}[Q_t \sim q\sqrt{t}] \leq -\frac{q^3}{12(R+c)^2} \quad (6.38)$$

La décroissance (6.37) se généralise donc à tout système pour lequel $D(\rho) = 1$ et $\sigma(\rho)$ est à support compact. Les bornes (6.38) que nous avons obtenues sur cette décroissance sont loin d'être optimales : par exemple, pour l'exclusion symétrique, elles correspondent à

$$0.08 \leq \alpha = 0.82 \leq 1.68.$$

Pour montrer cette encadrement, notre point de départ est le principe de grandes déviations (6.5). À partir de celui-ci, nous pouvons formuler un problème d'optimisation dont $\log \text{Pro}[Q_t \simeq q\sqrt{t}]$ est solution :

$$\frac{\log \text{Pro}[Q_t \simeq q\sqrt{t}]}{\sqrt{t}} = \max_{\rho, j} \left[-\mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) - \iint dx d\tau \frac{(j + \partial_x \rho)^2}{2\sigma(\rho)} \right], \quad (6.39)$$

où l'optimum est pris sur les profils (j, ρ) satisfaisant $\int_0^1 d\tau j(0, \tau) = q$ ainsi que les conditions aux bord du problème. Celles-ci sont libres dans le cas d'une mesure recuite (4.1), que nous noterons $\text{Pro}^{(r)}$; en revanche, dans le cas d'une mesure gelée (4.2), notée $\text{Pro}^{(g)}$, nous devons imposer la condition $\rho(x, 0) = r(x)$. Puisque le maximum de (6.39) court sur un ensemble plus restreint de profils, nous avons, par construction,

$$\text{Pro}^{(g)}[Q_t \simeq \sqrt{t}q] \leq \text{Pro}^{(r)}[Q_t \simeq \sqrt{t}q].$$

Il nous suffit donc de montrer la borne inférieure de (6.38) dans le cas gelé et sa borne supérieure dans le cas recuit.

Pour borner inférieurement (6.39), nous pouvons nous contenter d'étudier un choix particulier de profils (ρ, j) satisfaisant à $\int_0^1 d\tau j(0, \tau) = q$. Considérons donc le choix suivant :

$$j(x, \tau) = \begin{cases} q & \text{pour } -q(1-\tau)/\rho_a \leq x \leq q\tau/\rho_a; \\ -\partial_x \rho & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce choix consiste à déplacer le segment de particules $x \in [-q/\rho_a, 0]$, initialement occupé par q particules de densité ρ_a , à la position $[0, q/\rho_a]$, avec une vitesse uniforme, pendant le temps $0 \leq \tau \leq 1$, tout en le gardant à la densité uniforme ρ_a . Cette évolution conduit bien à faire passer q particules à travers l'origine, et remplit la condition $\rho(x, 0) = r(x)$ de la moyenne gelée : nous obtenons donc

$$\frac{\log \text{Pro}^{(g)}[Q_t \simeq \sqrt{t}q]}{\sqrt{t}} \geq - \int_0^1 d\tau \int_{-q(1-\tau)/\rho_a}^{q\tau/\rho_a} dx \frac{q^2}{2\sigma(\rho_a)} = - \frac{q^3}{2\rho_a\sigma(\rho_a)},$$

qui correspond à la borne inférieure de (6.38).

Intéressons-nous maintenant à la borne supérieure de (6.38). À cause de la relation de fluctuation-dissipation (6.4), la fonction $\mathcal{F}_0(\rho(x, 0))$ diverge dès que $\rho(x, 0)$ sort de $[0, R]$: il nous suffit donc de considérer, dans le cas recuit de (6.39), des profils initiaux $\rho(x, 0)$ compris entre 0 et R . Utilisant $\mathcal{F}_0(\rho(x, 0)) \geq 0$ et $\sigma(\rho) \leq 2(\rho + c)$, nous pouvons borner $\text{Pro}^{(g)}[Q_t \simeq q\sqrt{t}]$ de la manière suivante :

$$\frac{\log \text{Pro}^{(r)}[Q_t \simeq q\sqrt{t}]}{\sqrt{t}} \leq \max_{j, \rho} - \iint dx d\tau \frac{(j + \partial_x \rho)^2}{4(\rho + c)}.$$

Or, le maximum de l'expression de droite correspond au modèle ZRP de particules sans interactions, que nous avons étudié dans la section 6.3.2, en posant

$$\rho(x, \tau) = \rho^{(\text{ZRP})}(x, \tau) + c.$$

La condition $0 \leq \rho(x, 0) \leq R$ se traduit par $c \leq \rho^{(\text{ZRP})}(x, 0) \leq R + c$. Il se conçoit facilement que, pour le ZRP, la condition initiale la plus favorable à un courant positif consiste à prendre $\rho^{(\text{ZRP})}(x, 0) = R + c$ pour $x < 0$ et $\rho^{(\text{ZRP})}(x, 0) = c$ pour $x > 0$: or, cette condition équivaut à considérer la version gelée du ZRP, pour $\rho_a = R + c$ et $\rho_b = c$. À partir de (6.28), nous obtenons donc

$$\frac{\log \text{Pro}^{(r)}[Q_t \simeq q\sqrt{t}]}{\sqrt{t}} \leq - \frac{q^3}{12(R + c)^2},$$

aboutissant ainsi à la borne supérieure de (6.38).

Perspectives

L'étude des fluctuations de courant d'un système diffusif en géométrie infinie s'est révélée très riche. Elle nous a donné l'occasion d'appliquer, pour la première fois, les méthodes de la théorie macroscopique des fluctuations à un système totalement transient, et de comparer les résultats obtenus à ceux issus d'une approche complètement microscopique ; nous avons également pu nous pencher sur des phénomènes n'apparaissant qu'en l'absence d'état stationnaire, telle l'influence du choix de la condition initiale du système.

Deux des résultats que nous avons obtenus mettent en évidence des symétries du problème : la dépendance de la fonction génératrice $\langle e^\lambda Q_t \rangle_{\rho_a, \rho_b}$ en un seul paramètre $\omega(\lambda, \rho_a, \rho_b)$ (5), obtenue tout d'abord de manière microscopique dans un cas particulier (section 5.1) puis généralisée à une plus large gamme de systèmes (6.34) à l'aide de la théorie macroscopique (section 6.4), d'une part ; et d'autre part un théorème des fluctuations hors d'équilibre (6.15), découlant de la symétrie par renversement du temps de la théorie macroscopique (section 6.2).

Ces deux résultats ne sont sans doute que des cas particuliers de phénomènes plus généraux, dont il serait très intéressant de cerner les hypothèses. Il est à peu près certain qu'ils sont indépendants de la géométrie du système, et s'appliquent sans doute à toute situation où deux systèmes, initialement à l'équilibre mais à des densités différentes, sont mis en contact pendant un temps t . La dépendance en un seul paramètre s'interprète comme une "invariance par rotation" de la théorie macroscopique : on pourrait donc imaginer la généraliser en recherchant d'autres transformations préservant l'action. Le théorème des fluctuations, quant à lui, ne semble dépendre que de la réversibilité de la dynamique microscopique du système : nous pouvons donc envisager qu'il se généralise à une vaste classe de situations, par exemple à des systèmes extensifs quelconques.

L'approche microscopique développée dans la section 5 est intrigante à plusieurs titres. Tout d'abord, sa résolution repose sur une succession d'identités combinatoires (équations (5.9) et (5.11)) obtenues au prix de nombreux efforts par Tracy et Widom : pour cette raison, il est très difficile de l'adapter à d'autres situations, comme l'étude de la moyenne "gelée" (4.2). Il semble probable que ces identités soient la conséquence d'une structure intrinsèque de l'Ansatz de Bethe qui reste à découvrir.

L'émergence, au terme du calcul, de formules déterminantales simples, souvent reliées à la théorie des matrices aléatoires, est une autre "curiosité" de l'approche microscopique.

Elle est sans doute la conséquence d'un lien plus profond entre les problèmes d'exclusion et les matrices aléatoires qui mériterait d'être approfondi.

La théorie macroscopique des fluctuations, à laquelle la section 6 est consacrée, apporte son propre lot d'interrogations. Tout d'abord, notre incapacité à la résoudre exactement, excepté en l'absence d'interactions (section 6.3.2), contraste avec l'existence d'un résultat microscopique exact pour l'exclusion symétrique : nous pourrions envisager, par exemple, de nous aider de l'approche microscopique pour calculer les solutions du problème d'optimisation (6.9) dans le cas du SSEP, puis de les généraliser à d'autres systèmes diffusifs.

Il est peut-être également possible d'effectuer une étude plus précise de la décroissance de la loi du courant Q_t , en résolvant la théorie de manière approchée pour de grandes fluctuations de courant, ce qui nous permettrait d'obtenir exactement le coefficient de la décroissance cubique (6), dont nous ne connaissons la valeur que dans le cas du SSEP et que nous avons généralisée dans la section 6.5 à d'autres systèmes.

Deuxième partie

Conduction et corrélations anormales dans les systèmes mécaniques 1D

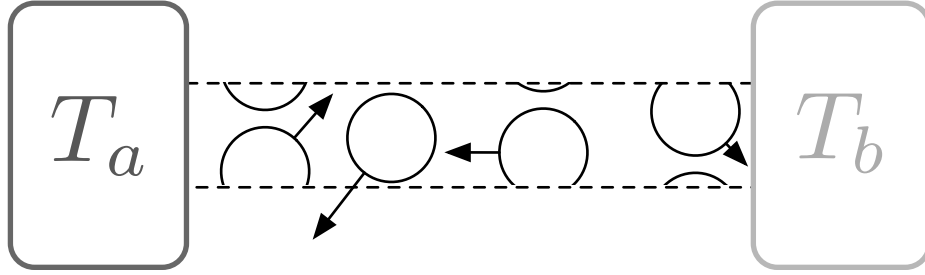


FIGURE 7.1 – Mesure du flux de chaleur dans un système placé entre deux réservoirs. Après un temps suffisamment long, les statistiques du courant Q_t ne dépendent plus de la section S considérée.

Cette partie est consacrée à l'étude du comportement hors d'équilibre de systèmes mécaniques simples à une dimension. Dès les années 1950, ces systèmes ont fait l'objet des premières études numériques (sur le calculateur MANIAC I, à Los Alamos) : celles-ci ont révélé des propriétés inhabituelles (absence de thermalisation, non-ergodicité) qui ont fait l'objet de nombreux travaux.

Parmi ces propriétés, nous nous sommes intéressés à celle de conduction anormale, qui consiste à considérer l'état stationnaire d'un système mécanique de longueur L , couplé à ses deux extrémités à des réservoirs d'énergie dont les températures T_a et T_b diffèrent. Une fois l'état stationnaire atteint, le système est traversé par un flux d'énergie du chaud vers le froid. La quantité totale d'énergie dans le système ne pouvant croître indéfiniment avec le temps, le flux d'énergie Q_t à travers une section S du système pendant un temps t devient indépendant de la position de S pour t suffisamment grand : sa moyenne croît alors linéairement avec t . Selon la loi de Fourier, ce flux devrait également décroître avec la longueur du système, en $1/L$ pour L suffisamment grand : c'est le cas pour un système diffusif, comme l'exclusion symétrique étudiée dans la partie 1.

En revanche, plusieurs modèles mécaniques dont la dynamique conserve l'impulsion (la quantité de mouvement) semblent vérifier une loi de Fourier anormale, de la forme

$$\frac{\langle Q_t \rangle}{t} \simeq \frac{C_1(T_a, T_b)}{L^{1-\alpha}}. \quad (7.1)$$

α , l'exposant de la loi anormale, s'avère difficile à déterminer précisément, et semble varier selon le système mécanique considéré : la valeur admise pour le modèle de Fermi-Pasta-Ulam (section 8.1) cubique ainsi que pour le gaz bipartite de bâtons durs (section 8.2) est $\alpha = 1/3$, tandis qu'elle serait plus élevée ($\alpha \simeq 0.4$) pour le modèle FPU quartique.

Plusieurs arguments théoriques ont été avancés pour expliquer cette anomalie, l'un par analyse dimensionnelle de l'équation de Navier-Stokes bruitée, l'autre par analyse du couplage des modes lents dans cette même équation. Les valeurs de α auxquelles elles conduisent diffèrent, alors même que la validité de leur point de départ (l'éq. de Navier-Stokes) a été parfois mise en doute [59].

La difficulté de comprendre ces systèmes d'un point de vue théorique a conduit à l'étude de modèles simplifiés, exactement solubles, préservant l'anomalie. Par exemple,

une chaîne d'oscillateurs harmoniques affectée par un bruit conservant l'impulsion présente une loi de Fourier anormale avec $\alpha = 1/2$.

E. Brunet, B. Derrida et moi-même nous sommes d'abord intéressés à la généralisation de la loi de Fourier anormale (7.1) aux cumulants de Q_t . Nous avons mesuré numériquement les quatre premiers cumulants de Q_t pour le gaz bipartite de bâtons durs ainsi que pour un gaz de disques durs sur tore fin (voir 8.2). Tous les cumulants semblent décroître anormalement :

$$\frac{\langle Q_t^n \rangle_c}{t} \simeq \frac{C_n(T_a, T_b)}{L^{1-\alpha_n}} \text{ pour } 1 \leq n \leq 4, \quad (7.2)$$

avec $0.25 \leq \alpha_n \leq 0.4$. Les cumulants pairs de Q_t peuvent également être mesurés à l'équilibre $T_a = T_b$: nous avons également mesuré dans ce cas une décroissance anormale avec des exposants α'_n du même ordre. Enfin, nous avons mesuré $\langle Q_t^2 \rangle_c$ et $\langle Q_t^4 \rangle_c$ pour un système périodique de longueur L : dans ce cas, il semble que

$$\frac{\langle Q_t^2 \rangle_c^{\text{circ.}}}{t} \simeq \frac{C'_2(T_a, T_b)}{L^{0.5}} \text{ et } \frac{\langle Q_t^4 \rangle_c^{\text{circ.}}}{t} \simeq L^{0.5} C'_4(T_a, T_b).$$

Les exposants anormaux des cumulants de Q_t dépendent donc fortement de la géométrie du système : en particulier, le quatrième cumulant semble croître avec L dans le cas périodique.

En collaboration avec J. Lebowitz, nous nous sommes ensuite intéressés à une version simplifiée du gaz de bâtons durs, le modèle de Ianiro-Lebowitz (section 8.3). Les mesures numériques que nous avons effectuées pour ce modèle correspondent à une loi de Fourier anormale (7.1), avec $\alpha \simeq 0.3$.

Cette observation est surprenante à deux abords. La dynamique de ce modèle ne conserve pas l'impulsion, indiquant que cette conservation n'est pas nécessaire à la conduction anormale ; de plus, pour ce modèle, l'équation de Boltzmann est exactement soluble, et prédit une loi de Fourier normale (section 9.4).

Le non-respect de l'équation de Boltzmann dans le cas de ce modèle nous a conduit à étudier les corrélations des champs d'impulsion et d'énergie des systèmes anormaux dans l'état stationnaire, puisque la fermeture du terme de collision de l'équation de Boltzmann revient à négliger ces corrélations. Pour le gaz bipartite de bâtons durs et pour le modèle d'Ianiro-Lebowitz, nous avons mesuré une croissance anormale de ces corrélations : par exemple, pour le gaz de bâtons durs, le champ d'impulsion $p_L(x)$ semble décroître en

$$\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c \simeq \frac{1}{L^{0.6}} f\left(\frac{x-y}{L^{0.6}}\right).$$

Cette décroissance semble plus lente que celle observée dans les systèmes diffusifs, dont les états stationnaires hors d'équilibre sont la plupart du temps caractérisés par des corrélations à longue portée d'ordre $1/L$ [30, 33, 39, 87, 95, 97]. L'échelle spatiale de ces corrélations semble également surprenante : en $L^{0.6}$, elle correspondrait à une échelle mésoscopique intermédiaire entre les scalings microscopique ($|x-y| \sim 1$) et macroscopique ($|x-y| \sim L$).

Quelques modèles mécaniques 1D

8.1 Le modèle de Fermi-Pasta-Ulam

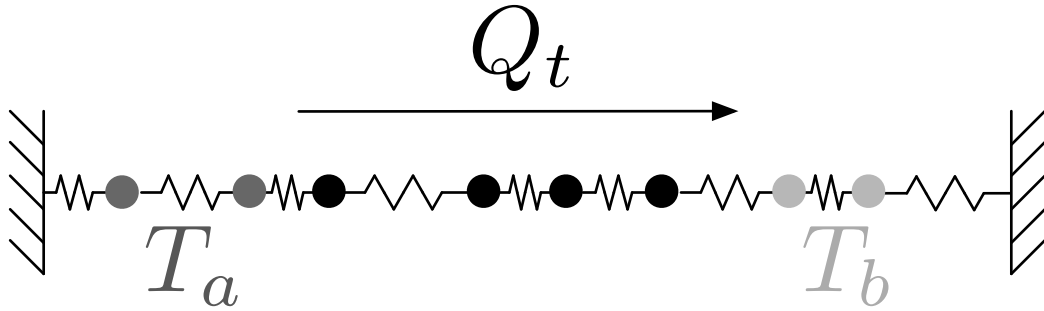


FIGURE 8.1 – Chaîne d'oscillateurs anharmoniques (modèle de Fermi-Pasta-Ulam) en géométrie ouverte (fig. 7.1).

Le modèle de Fermi-Pasta-Ulam a fait l'objet d'une des toutes premières études numériques en physique statistique. Il consiste en une chaîne de L oscillateurs légèrement anharmoniques :

$$E = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i V(x_{i+1} - x_i - 1) \text{ avec } V(r) = \frac{r^2}{2} + \alpha \frac{r^3}{3} + \beta \frac{r^4}{4}.$$

Les interactions s'effectuant entre les positions relatives des particules de la chaîne, la dynamique microscopique de ce modèle conserve bien l'impulsion localement.

Le cas $\alpha \neq 0$ (dans lequel il faut aussi prendre $\beta > 0$ pour que la chaîne soit stable) est qualifié de modèle FPU- α , le cas $\alpha = 0$ de modèle FPU- β . Les deux extrémités de la chaîne sont fixées ($x_0 = 0$, $x_{L+1} = L$). Plusieurs formes de couplage aux réservoirs ont été étudiées. La plupart consistent à remplacer les équations d'évolution des particules aux extrémités de la chaîne par des équations de Langevin bruitées aux températures T_a ou T_b : ces bains de Langevin ont parfois été remplacés par des thermostats de Nosé-Hoover (déterministes).

Dans une telle configuration, la conduction de chaleur totale observée à travers le système est affectée à la fois par la résistance du système lui-même (que l'on cherche à mesurer) et par celles des connections du système aux deux réservoirs : afin de diminuer ces dernières, les études les plus récentes, plutôt que de ne connecter que la première et la dernière particule aux réservoirs, préfèrent thermaliser des nombres finis de particules (les vingt premières et les vingt dernières, par exemple), afin que la résistance des interfaces entre le système et les réservoirs ne domine pas les mesures de courant.

En l'absence de perturbations anharmoniques, le modèle FPU devient exactement soluble. Les modes d'oscillations de la chaîne (les phonons) évoluent alors indépendamment les uns des autres, aboutissant à une conduction ballistique, indépendante de la taille du système ($\alpha = 1$ dans (7.1)).

Les modèles FPU- α et FPU- β doivent quant à eux être étudiés numériquement. Partant d'une configuration initiale arbitraire (en général un profil thermalisé dont la température décroît linéairement de T_a à T_b), l'évolution du système est simulée jusqu'à satisfaction d'un critère choisi comme représentatif de l'état stationnaire : uniformité du flux d'énergie en les différents points de la chaîne, stabilité des profils de température, thermalisation des vitesses des particules... Le courant est alors mesuré, aux réservoirs ou à partir du profil de température dans le système.

8.2 Gaz de particules élastiques

8.2.1 Gaz de bâtons durs

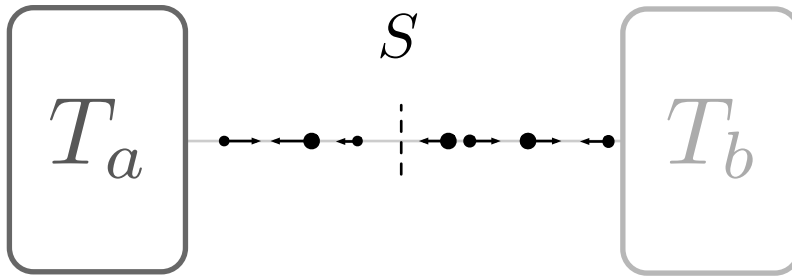


FIGURE 8.2 – Gaz de bâtons durs bipartite (particules élastiques unidimensionnelles de masses alternées) en géométrie ouverte.

Le gaz de bâtons durs est un autre modèle simple présentant une conduction anormale. L particules ponctuelles sont disposées sur un segment de longueur L . Elles se déplacent à vitesse constante, des collisions élastiques se produisant lorsque deux particules se rencontrent : ainsi, comme pour le modèle de Fermi-Pasta-Ulam, la dynamique microscopique conserve l'impulsion.

Ces collisions élastiques se réduisant à un échange de vitesses lorsque les deux particules sont de même masse, il est nécessaire de faire varier la masse des particules pour que le système ne se comporte pas comme un gaz parfait. La prescription la plus fréquemment choisie consiste à considérer un gaz bipartite où les particules ont des masses

alternées 1 et $m_2 > 1$, tout en prenant garde à ce que les première et dernière particules (qui seront couplées aux réservoirs à T_a et T_b) aient la même masse.

Les réservoirs eux-mêmes doivent être choisis de manière à ne pas affecter le nombre de particules dans le système, faute de quoi l'état stationnaire peut être traversé par un flux ballistique de particules à même d'assurer un transport d'énergie convectif, lequel ne décroîtrait pas avec L ($\alpha = 1$). Ils sont donc implémentés de la manière suivante : lorsque la première ou la dernière particule sort du segment, elle est renvoyée vers l'intérieur avec une vitesse dont la distribution est celle d'une particule thermalisée, à la température T_a pour la première particule et T_b pour la dernière, soit

$$\rho_a(v) = \theta(v) \frac{v}{T_a} e^{-v^2/2T_a} \text{ et } \rho_b(v) = \theta(-v) \frac{|v|}{T_b} e^{-v^2/2T_b}. \quad (8.1)$$

À partir d'une condition initiale arbitraire (particules disposées aléatoirement et thermalisées à l'une des deux températures, par exemple), l'évolution du système est simulée en calculant l'état du système de collision en collision. Pour ce faire, la simulation comporte une "pile" des instants de collision à venir : ceci permet de ramener le coût de la simulation d'une unité de temps microscopique dans un système de taille L à $\mathcal{O}(L \log L)$ (au lieu de $\mathcal{O}(L^2)$ pour un algorithme naïf).

Une fois l'état stationnaire atteint (voir 10.2), le flux Q_t peut être mesuré de deux manières différentes : soit en comptant le flux d'énergie à travers une section S fixée sur le segment $[0, L]$, soit en intégrant de 0 à t le flux moyen d'énergie instantané

$$F_t = \frac{1}{L} \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^3.$$

Comme nous le verrons dans 10.2, la comparaison de ces deux mesures peut fournir un critère supplémentaire de convergence vers l'état stationnaire.

Géométrie circulaire

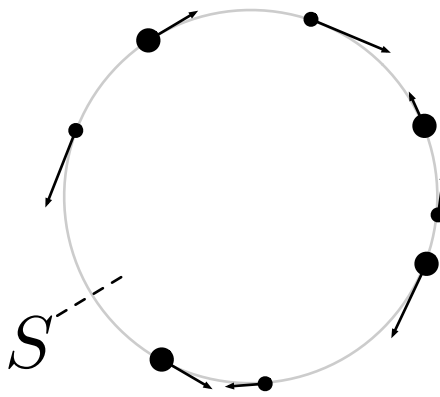


FIGURE 8.3 – Gaz de bâtons durs bipartite en géométrie périodique.

L'étude des cumulants pairs de Q_t (qui ne s'annulent pas lorsque $T_a = T_b$ dans la géométrie ouverte ci-dessus) nous a conduit à nous intéresser au comportement d'équilibre

du gaz de bâtons durs sur un cercle de longueur L . En l'absence de réservoirs, l'évolution du gaz conserve l'impulsion totale $P = \sum m_i v_i$ et l'énergie totale $E = \frac{1}{2} \sum m_i v_i^2$ de la configuration initiale des particules.

Le choix de $P = 0$ s'impose pour éviter que le transport d'énergie soit dominé par l'effet convectif, ne décroissant pas avec L , d'un flux global de particules. De plus, si E n'est pas également fixé (échantillonnage canonique de la condition initiale), alors l'évolution de Q_t reste corrélée à l'énergie initiale E , quel que soit t : la présence de ces corrélations non décroissantes donne lieu à un comportement des cumulants de Q_t très différent de celui observé en géométrie ouverte (7.2), de la forme

$$\langle Q_t^{2n} \rangle \propto t^n.$$

Cette divergence plus rapide des cumulants de Q_t avec t traduit la non-ergodicité de la dynamique du système dans l'ensemble canonique : chaque évolution reste "confinée" à un sous-espace d'énergie E constante de l'ensemble des configurations échantillonnées. Pour rétablir l'ergodicité, il est nécessaire de limiter cet ensemble d'échantillonnage à une seule valeur de E (nous avons choisi $E = L$) : on observe alors bien des fluctuations de courant $\langle Q_t^n \rangle \propto t$ qui peuvent se comparer à celles en géométrie ouverte.

8.2.2 Disques durs sur tore fin

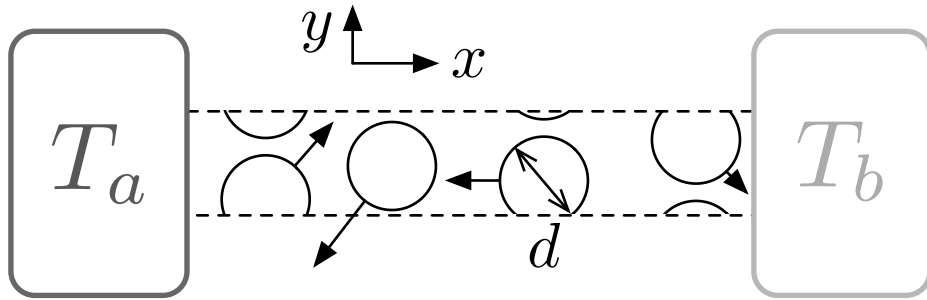


FIGURE 8.4 – Gaz de disques durs de diamètre d sur tore fin (de largeur 1) en géométrie ouverte.

Le modèle de gaz de bâtons durs ci-dessus présente l'inconvénient, comme nous l'avons vu, de se réduire à un gaz parfait lorsque les particules qui le composent sont identiques. Pour contourner cette limitation, notre intérêt s'est porté sur le modèle ci-dessus. Un gaz bidimensionnel de L disques durs de masse 1, soumis à des chocs élastiques, est placé sur un tore de taille $L \times 1$.

Le diamètre d des disques est choisi de telle sorte que chaque disque ne puisse interagir qu'avec ses deux voisins les plus proches. Pour cela, il faut éviter que les disques $i - 1$ et $i + 1$ ne puissent entrer en collision sans toucher le disque i . Il est suffisant de garantir que $a > d$ dans la figure 8.5 (où $y_{i-1} = y_{i+1} = y_i \pm 1/2$), ce qui correspond à $d > 1/\sqrt{3}$: nos simulations ont été effectuées pour $d = 0.6$.

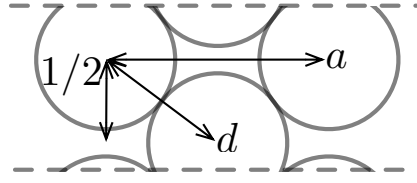


FIGURE 8.5 – Condition extrême permettant une collision entre disques non voisins dans le gaz de disques durs sur tore fin. Pour $a \leq d$ (soit $d \leq 1/\sqrt{3}$), les particules de gauche et de droite peuvent entrer en collision sans contact avec celle du centre.

Par rapport au gaz de bâtons durs, ce système présente une quantité conservée supplémentaire (l'impulsion verticale) : toutefois, le rôle des vitesses verticales dans le transport d'énergie se réduisant à celui d'une sorte de réservoir d'énergie interne à chaque particule, nous nous attendons, a priori, à ce que cet ajout ne modifie pas le caractère anormal de la conduction.

De même que pour le gaz de bâtons durs, les réservoirs renvoient les particules sortant du système vers l'intérieur avec des vitesses thermalisées aux températures T_a et T_b . Le courant est quant à lui mesuré, soit en comptant le flux d'énergie cinétique à travers une section S , soit en intégrant en temps le flux instantané d'énergie selon l'horizontale :

$$F_t = \sum_i \frac{1}{2} m (v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2) v_{i,x}.$$

8.3 Le modèle d'Ianiri-Lebowitz

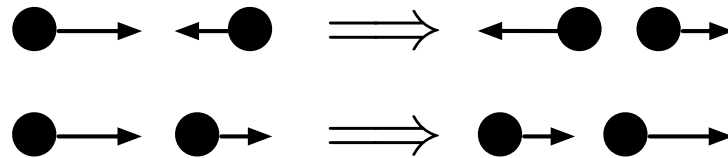


FIGURE 8.6 – Règle de collision du modèle d'Ianiri-Lebowitz : les particules circulant dans des directions opposées renversent leurs vitesses, celles circulant dans la même direction les échangent.

Le modèle d'Ianiri-Lebowitz [61] est une version simplifiée du gaz de bâtons durs présenté dans la section 8.2 qui consiste en une modification de la règle de collision entre particules. Lors d'une collision entre la particule i et la particule $i+1$, cette règle (figure 8.6) stipule que :

- si leurs vitesses v_i et v_{i+1} sont initialement de signes opposés, soit $v_{i+1} < 0 < v_i$, alors la collision a pour effet de les renverser, soit $v_i \rightarrow -v_i$ et $v_{i+1} \rightarrow -v_{i+1}$;

- si elles sont au contraire de même signe, alors les particules se doublent sans se voir, soit $v_i \rightarrow v_{i+1}$ et $v_{i+1} \rightarrow v_i$ (les particules restant indexées de gauche à droite).

Dans un tel système, il est à nouveau possible de considérer des particules identiques : nous les prendrons par la suite de masse 1.

Contrairement à la règle de collision élastique qu'elle remplace, la règle de Ianiro-Lebowitz ne conserve pas l'impulsion. Cependant, elle possède la propriété de conserver les valeurs absolue des vitesses $\{|v_i|\}_{1 \leq i \leq L}$: ainsi, le modèle I-L comporte en réalité beaucoup plus de quantités conservées que le modèle de Fermi-Pasta-Ulam ou les gaz de particules dures.

À cause de cette propriété, le modèle I-L est incapable de se thermaliser : contrairement au gaz de bâtons durs, une modification des lois $\rho_a(v)$ et $\rho_b(v)$ des vitesses d'injection aux réservoirs peut avoir des effets sur l'ensemble du système. Par exemple, soit $v_a > v_b > 0$: on peut considérer les lois

$$\rho_a(v) = \delta(v - v_a) \text{ et } \rho_b(v) = \delta(v + v_b), \quad (8.2)$$

qui reviennent à injecter toutes les particules du réservoir de gauche à la vitesse v_a et toutes celles du réservoir de droite à la vitesse $-v_b$. Alors toutes les particules présentes dans le système auront pour vitesses $\pm v_a$ ou $\pm v_b$: on qualifiera ce cas de modèle I-L à deux vitesses, par oppositions à un modèle I-L gaussien ayant pour lois d'injection les lois gaussiennes (8.1).

Résultats connus sur la conduction

9.1 Observations numériques d’une loi de Fourier anormale

9.1.1 Gaz de bâtons durs bipartite

Les premières mesures numériques de la conduction dans la gaz de bâtons durs bipartites, menées par P. Garrido, L. Hurtado et B. Nadrowski en 2001, concluaient à une loi de Fourier normale ($\alpha = 0$ et $\langle Q_t \rangle / t \propto 1/L$). Au vu des grandes tailles étudiées (par rapport aux moyens numériques utilisées), il est probable que les systèmes utilisés pour la mesure n’aient pas atteint leurs états stationnaires.

Des études ultérieures, résumées dans le tableau ci-dessous, ont permis de conclure à une loi de Fourier anormale :

Auteur	Date	m_2	L (max.)	α
Garrido & al. [50]	2001	$\varphi = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$	2000	0
Dhar [36]	2001	1.078 à 1.44	1281	0.2
Savin & al. [94]	2002	φ	640	0.2
Grassberger & al. [54]	2002	1.22 à 5	16383	0.32
Casati & al. [22]	2003	φ	12800	0.25

La valeur $\alpha = 1/3$ semble aujourd’hui faire consensus parmi les numériciens, ceci d’autant plus qu’elle correspond aux prédictions des deux approches théoriques exposées dans la section 9.2 (qui coïncident pour ce modèle).

Les différences entre les valeurs de α observées par les différentes études semblent provenir de la persistance d’effets de taille finie dans la mesure de $\langle Q_t \rangle / t$. Leur influence semble plus ou moins importante selon la valeur de la masse m_2 (voir fig. 9.1) : en particulier, les mesures effectuées à $m_2 = 1.6$ ne dévient de $\alpha \sim 0.25$ qu’à partir de $N = 2000$.

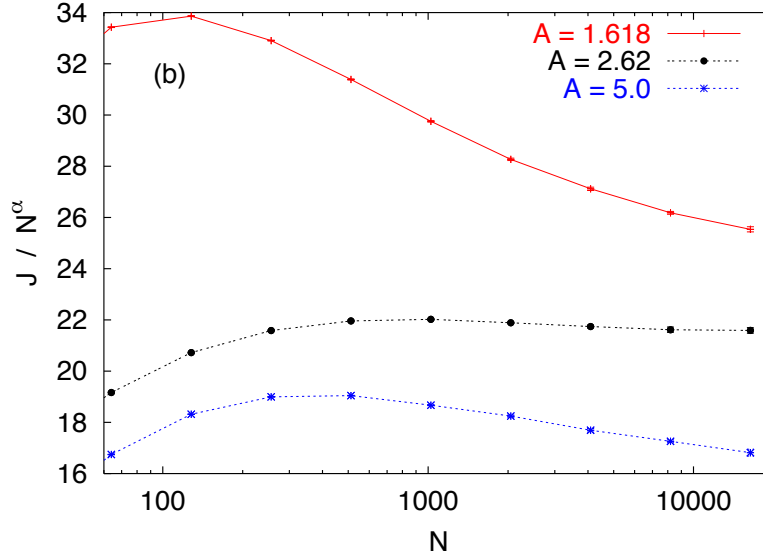


FIGURE 9.1 – Valeurs de $L^{0.68} \times \langle Q_t \rangle / t$ ([54], p. 2) dans un gaz de bâtons durs bipartite avec $m_2 = 1.618$ (rouge), $m_2 = 2.62$ (noir) et $m_2 = 5$ (bleu), pour $16 \leq N \leq 16384$.

9.1.2 Modèles de Fermi-Pasta-Ulam FPU- α et FPU- β

La plupart des études numériques de la conduction dans les modèles de Fermi-Pasta-Ulam se concentrent sur le cas d'une anharmonie quartique (FPU- β). Pour les modèles présentant une anharmonie cubique (FPU- α , ou FPU- $\alpha\beta$ dans [103]), il est communément admis que, de même que pour le gaz de bâtons durs, l'exposant de la conduction anormale vaut $\alpha = 1/3$.

En revanche, une controverse subsiste au sujet de l'exposant α du modèle FPU- β à anharmonie quartique : les valeurs $1/2$, $2/5$ et $1/3$ ont été proposées successivement, sans parvenir à une conclusion définitive. Les résultats des principales études sont résumés dans le tableau ci-dessous.

Auteur	Date	L (max.)	α
Lepri & al. [74]	1997	400	0.55
Lepri & al. [75]	1998	2048	0.37
Lepri & al. [77]	2003	65536	0.4
Mai & al. [84]	2007	8192	0.33
Wang & al [103]	2011	131072	≥ 0.4

Les simulations permettent d'exclure avec une certaine certitude l'exposant $1/2$ prédit par une explication théorique potentielle de la conduction anormale (voir 9.2.2). Toutefois, deux valeurs "candidates" différentes, $1/3$ et $2/5$, persistent.

Selon [103], cette situation est causée par la présence d'effets de taille finie à des tailles nettement plus importantes dans le FPU- β . La figure 9.2 montre de manière convaincante l'importance de ces effets sur l'exposant du FPU- $\alpha\beta$: l'exposant α , proche de 0.2 jusqu'à $L \sim 10^3$, s'approche ensuite de $1/3$ jusqu'à $L \sim 10^5$. Le même phénomène semble se produire dans le cas du FPU- β , mais les tailles simulées sont trop petites pour

atteindre la même certitude.

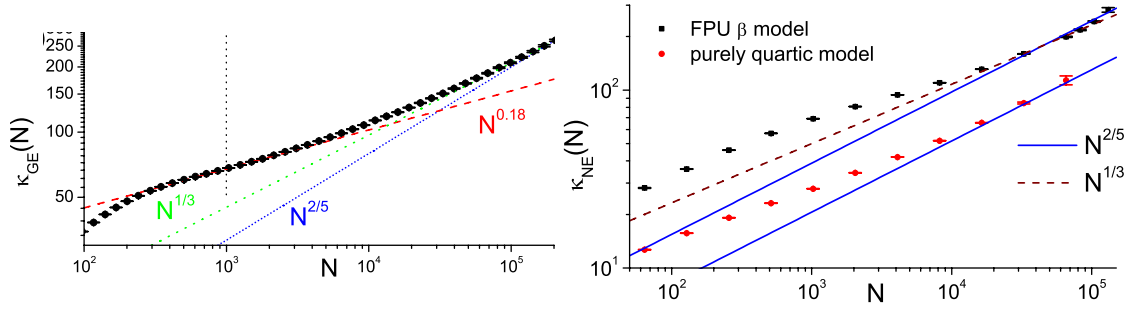


FIGURE 9.2 – Conductivité $L \times \langle Q_t \rangle / t$ dans les modèles FPU- $\alpha\beta$ (gauche) et FPU- β (droite, points noirs) pour $16 \leq L \leq 131072$ ([103], pp. 2-4). La valeur de α observée croît de 0.2 à $1/3$ pour le FPU- $\alpha\beta$, et semble dépasser $1/3$ dans le cas du FPU- β .

9.2 Des prédictions théoriques parfois contradictoires

9.2.1 Analyse dimensionnelle de l'équation de Navier-Stokes

O. Narayan et S. Ramaswamy ont présenté en 2002 [86] un raisonnement s'appliquant à tout système unidimensionnel dont la dynamique préserve énergie, impulsion et nombre de particules. À partir de considérations dimensionnelles, les auteurs prédisent, sous ces hypothèses, une conduction anormale (7.1) d'exposant $\alpha = 1/3$.

Comme nous l'avons vu ci-dessus, cette prédiction semble plus ou moins confirmée par les mesures numériques pour le gaz de bâtons durs bipartite (fig. 9.1), ainsi que pour les modèles de Fermi-Pasta-Ulam présentant une anharmonie cubique (fig. 9.2). Dans ces cas, elle coïncide également avec la valeur fournie par l'approche du couplage de modes présentée en 9.2.2. En revanche, les études numériques du FPU- β (anharmonie quartique) tendent à indiquer un exposant supérieur à $1/3$, bien qu'il soit impossible d'y conclure avec certitude en l'état actuel des simulations.

Présentons maintenant brièvement cet argument. Nous assimilons le système à un milieu continu de taille L , décrit par des champs conservés de densité $\rho(x, t)$, de vitesse $v(x, t)$ et d'énergie $\varepsilon(x, t)$ satisfaisant les équations hydrodynamiques

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0 \quad (9.1)$$

$$\partial_t(\rho v) + \partial_x(v \rho v) = -\partial_x p + \xi \partial_x^2 v + \eta_v \quad (9.2)$$

$$\partial_t \varepsilon + \partial_x(v(p + \varepsilon)) = \partial_x(\kappa \partial_x T) + \eta_\varepsilon \quad (9.3)$$

où les champs de température T et de pression p sont des fonctions locales de ρ , v et ε , ainsi que les coefficients de viscosité ξ et de conduction κ . Parmi ces équations, seule (9.1) est déterministe : l'équation de Navier-Stokes (9.2) et la loi de Fourier locale (9.3) sont fluctuantes, l'amplitude des bruits blancs $\eta_v(x, t)$ et $\eta_\varepsilon(x, t)$ dépendant de L .

Considérons d'abord une situation d'équilibre dans laquelle le système est au contact de deux bains à la même température T . Les champs ρ , v , et ε connaissent alors des fluctuations autour de leurs valeurs d'équilibre :

$$\begin{cases} \rho(x, t) = \rho_0 + \delta\rho(x, t) \\ v(x, t) = \delta v(x, t) \\ \varepsilon(x, t) = \varepsilon_0 + \delta\varepsilon(x, t) \end{cases} .$$

Pour L assez grand, nous faisons l'hypothèse que ces fluctuations deviennent gaussiennes et extensives, de telle sorte que dans l'état stationnaire, la probabilité d'observer un écart $\delta\rho(x)$ s'exprime comme $\text{Pro}[\delta\rho(x, \tau)] \propto \exp[-C \int \delta\rho(x)^2 dx]$. Comme $\int \delta\rho(x)^2 dx \sim L|\delta\rho|^2$, il en découle que, dans l'état stationnaire, $\delta\rho$, $|\delta v|$ et $\delta\varepsilon$ sont d'ordre $\sim 1/\sqrt{L}$.

Nous nous intéressons à présent à l'influence sur la conduction de fluctuations $\delta\rho$, δv , $\delta\varepsilon$ à l'échelle du système entier. Le courant $j_\varepsilon(x)$ d'énergie induit par de telles fluctuations vérifie $\partial_t \varepsilon + \partial_x j_\varepsilon = 0$, soit $j_\varepsilon \simeq (\delta\varepsilon + \delta p)v - \kappa_0 \partial_x \delta T$: parmi ces termes, $\partial_x \delta T \sim 1/L^{3/2}$ (T étant fonction de (ρ, ε) , δT est d'ordre $1/\sqrt{L}$) alors que $(\delta\varepsilon + \delta p)v \sim 1/L$. Ainsi, le premier terme est dominant dans j_ε : les fluctuations de ρ , v et de ε entraînent donc des fluctuations de courant $j_\varepsilon \sim 1/L$.

Nous pouvons aussi estimer l'échelle de temps associée à un système de taille L : les non-linéarités étant introduites dans (9.1-9.3) par les termes convectifs en $\partial_x(v \cdot)$, et v étant lui-même d'ordre $1/\sqrt{L}$, on en déduit que l'échelle de temps pertinente (telle que $\partial_t(\cdot)$ et $\partial_x(v \cdot)$ soient du même ordre) est $t \sim L^{3/2}$.

À l'aide de ces deux résultats, il devient possible d'estimer le coefficient de réponse ξ d'un système placé dans un état stationnaire proche de l'équilibre, entre deux réservoirs à des températures T_a et T_b proches. En l'absence d'un flux d'énergie convectif lié à un courant d'impulsion dans le système (ce qui doit être assuré par le choix des couplages du système aux réservoirs, voir par exemple la section 8.2.1), ξ est relié au flux moyen d'énergie $\langle Q_t \rangle$ dans l'état stationnaire par

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t \rangle}{t} = \xi \frac{(T_a - T_b)}{L} = \xi \frac{\Delta T}{L} .$$

De plus, ξ s'exprime à partir de la fonction d'autocorrélation de $j_\varepsilon(x, \tau)$ d'un système à l'équilibre par une relation de fluctuation-dissipation (connue dans ce cas sous le nom de formule de Green-Kubo) :

$$\xi = \frac{1}{kT} \lim_{L \rightarrow \infty} L \int_0^\infty dt \langle j_\varepsilon(x, t) j_\varepsilon(x, 0) \rangle_L = \frac{1}{kT} \int_0^\infty dt C_\infty(t) \quad (9.4)$$

où $C_L(t) = L \langle j_\varepsilon(x, t) j_\varepsilon(x, 0) \rangle_L$. À partir des scalings $j_\varepsilon(x, t) \sim 1/L$ et $t \sim L^{3/2}$, on peut obtenir la dépendance en t de $C_\infty(t)$, dans lequel L n'intervient plus :

$$C_\infty(t) \propto t^{-2/3} .$$

L'intégrale en t de $C_\infty(t)$ est en apparence divergente. Toutefois, l'expression (9.4) néglige l'effet que peuvent avoir, dans un système ouvert de taille L , les réservoirs sur les

fluctuations responsables de $C_\infty(t)$: en effet, ceux-ci absorbent ou réfléchissent partiellement les perturbations qui les atteignent. Ces fluctuations se propageant ballistiquement à la vitesse du son dans le système, c_s , les réservoirs ont pour effet de faire décroître exponentiellement C_L à partir d'un temps $t_{\text{cutoff}} \propto L$: celui-ci intervient dans l'expression de ξ , de telle sorte que

$$\xi = \frac{1}{kT} \int_0^{t_{\text{cutoff}}} C_\infty(t) dt \propto \int_0^L t^{-2/3} dt \propto L^{1/3}$$

soit $\langle Q_t \rangle / t \propto L^{-2/3}$ et $\alpha = 1/3$. Ainsi, tous les systèmes mécaniques 1D conservant l'impulsion appartiendraient à une même classe d'universalité, caractérisée par une conduction anormale en $\alpha = 1/3$.

Remarquons que ce raisonnement repose sur plusieurs hypothèses difficiles à justifier : en particulier, la validité des équations hydrodynamiques (9.1-9.3) n'est *a priori* pas garantie [59].

9.2.2 Autres approches

Plusieurs raisonnements théoriques plus poussés que celui ci-dessus ont été avancés pour déterminer l'exposant α de la conduction anormale. Nous présenterons ici les résultats de deux de ces arguments : l'analyse par couplage de modes et ceux de la théorie cinétique de Peierls-Boltzmann.

Ces deux approches prennent pour point de départ un modèle de Fermi-Pasta-Ulam faiblement anharmonique, FPU- α ou FPU- β . Il est possible de traiter un tel système en considérant l'évolution de ses phonons (les modes d'oscillation de la chaîne) : ceux-ci évoluent presque indépendamment, l'anharmonie étant responsable d'un faible couplage avec des paires (dans le cas du potentiel cubique du FPU- α) ou avec des triplets (pour le potentiel quartique du FPU- α) de phonons de nombres d'onde différents.

Tout comme dans l'analyse dimensionnelle de 9.2.1, on considère que l'anomalie de la conduction provient des fluctuations à grande échelle ($\sim L$) du système, c'est à dire des phonons de petit nombre d'onde $k \sim 1/L$. Ceux-ci ne sont pas amortis par la partie harmonique du potentiel de la chaîne, mais subissent une force de rappel effective résultant de leur interaction avec les autres phonons : les deux théories cherchent à prédire les caractéristiques de cette "dynamique lente" pour en déduire ensuite les propriétés anormales de la conduction.

Dans l'analyse par couplage de modes [29, 75, 77], cette dynamique est obtenue en écrivant les équations satisfaites par les fonctions d'autocorrélation à deux temps des modes d'oscillations. Ces équations ne sont pas fermées (elles font intervenir des fonctions à trois temps) : après les avoir tronquées, une série d'approximations aboutit à déterminer la décroissance à temps long de ces corrélations, que l'on relie ensuite à la conduction par (9.4).

L'analyse de Peierls-Boltzmann [82, 88, 98] s'intéresse à cette dynamique lente par une approche différente : elle consiste à écrire une équation de Boltzmann pour les phonons [98], dont on étudie ensuite perturbativement l'opérateur de collisions pour en déduire le temps de relaxation effectif τ_k du phonon de nombre d'onde k . À partir de τ_k ,

il est possible de calculer la décroissance à temps long des corrélations du mode k , puis d'en déduire l'exposant de la conduction anormale.

Ces deux approches prédisent le même exposant $\alpha = 1/3$ dans le cas d'une anharmonie cubique (FPU- α) : de plus, cette valeur coïncide également avec celle issue de l'analyse dimensionnelle. Il n'y a pas, en revanche, d'accord en ce qui concerne le cas du FPU- β (anharmonie quartique), comme le montre le tableau ci-dessous :

Auteur	Date	α
Lepri & al. [75]	1998	2/5
Pereverzev [88]	2003	2/5
Delfini & al. [29]	2003	1/2
Lukkarinen & al. [82]	2008	2/5

Bien qu'il n'y ait pas d'accord sur la valeur de α dans le cas quartique, le consensus issu de ces approches est celui d'un scénario à deux classes d'universalité parmi les systèmes mécaniques 1D conservant l'impulsion [102]. Dans le cas générique (gaz de bâtons durs, modèle FPU- α), le couplage phonon-paires de phonons serait responsable d'une anomalie avec $\alpha = 1/3$; toutefois, si sa contribution s'annule (cas du modèle FPU- β), alors la conduction, dominée par l'effet du couplage phonon-triplet de phonons, prendrait un exposant $\alpha > 1/3$ différent.

9.3 Anomalie dans des modèles exactement solubles

L'absence d'interprétation claire de la conduction anormale dans les systèmes conservant l'impulsion usuels (le gaz de bâtons durs et la chaîne FPU) a entraîné la recherche de modèles présentant un écart à la loi de Fourier, mais suffisamment simples pour pouvoir être résolus exactement.

L'une des principales directions prises par ces recherches a consisté à modifier la chaîne d'oscillateurs harmoniques dont est issue le modèle de Fermi-Pasta-Ulam. Dans une chaîne totalement harmonique, les modes d'oscillations évoluent indépendamment les uns des autres, engendrant une conduction ballistique, indépendante de L ($\langle Q_t \rangle / t \sim C$, $\alpha = 1$).

Kipnis, Marchiorio et Presutti [67] ont étudié l'effet sur une telle chaîne de l'ajout d'un bruit conservant l'énergie. Ce bruit modifie les vitesses de couples de particules consécutives i et $i + 1$, de manière à ce qu'elles échangent une fraction aléatoire x de leurs énergies cinétiques ε_i et ε_{i+1} :

$$(\varepsilon_i, \varepsilon_{i+1}) \longrightarrow ((1-x)\varepsilon_i + x\varepsilon_{i+1}, (1-x)\varepsilon_{i+1} + x\varepsilon_i).$$

Le modèle correspondant est toujours exactement soluble, et ne présente plus de conduction ballistique : par contre, il vérifie la loi de Fourier ($\alpha = 0$).

Plus récemment, Basile, Bernardin et Olla [5] ont considéré un bruit conservant à la fois énergie et impulsion. Ce bruit modifie les vitesses de triplets de particules $(i - 1, i, i + 1)$, de telle sorte que

$$\begin{cases} v_{i-1} + v_i + v_{i+1} = \text{cte.} \\ v_{i-1}^2 + v_i^2 + v_{i+1}^2 = \text{cte.} \end{cases},$$

ce qui revient à faire diffuser le point (v_{i-1}, v_i, v_{i+1}) sur un cercle dans l'espace tridimensionnel. Il est possible de calculer exactement la conductivité du modèle correspondant : on obtient

$$\frac{\langle Q_t \rangle}{t} \propto \frac{1}{\sqrt{L}} \text{ soit } \alpha = 1/2.$$

Plus récemment, une autre forme de bruit conservant l'impulsion, consistant à échanger les vitesses de particules consécutives, a été étudiée par S. Lepri et al. [78] : elle aboutit également à une conduction anormale en $\alpha = 1/2$.

9.4 Équation de Boltzmann du modèle d'Ianaro-Lebowitz

Contrairement aux modèles exactement solubles ci-dessus, le modèle d'Ianaro-Lebowitz [61] a été introduit pour présenter un cas de conduction normale. En effet, sa règle de collision (fig. 8.6) a été choisie pour permettre d'écrire simplement l'équation de Boltzmann satisfaite par la fonction de distribution des particules dans le système, $f(x, v, t)$. Dans le cas à deux vitesses (8.2), où toutes les particules présentes dans le système ont pour vitesses $\pm v_a$ ou $\pm v_b$, elle s'écrit sous la forme d'un système de quatre équations sur les densités $f_{\pm a}(x, t)$ et $f_{\pm b}(x, t)$ des particules ayant pour vitesses $\pm v_a$ et $\pm v_b$:

$$\begin{cases} (\partial_t + v_a \partial_x) f_{+a} = (v_a + v_b)(f_{+b} f_{-a} - f_{-b} f_{+a}) \equiv A(x, t) \\ (\partial_t - v_a \partial_x) f_{-a} = -A(x, t) \\ (\partial_t + v_b \partial_x) f_{+b} = -A(x, t) \\ (\partial_t - v_b \partial_x) f_{-b} = A(x, t). \end{cases}$$

Les réservoirs imposent comme conditions aux bords

$$\begin{cases} f_{+b}(0, t) = f_{-a}(L, t) = 0 \\ v_a f_{+a}(0, t) = v_a f_{-a}(0, t) + v_b f_{-b}(0, t) \\ v_b f_{-b}(L, t) = v_a f_{+a}(L, t) + v_b f_{+b}(0, t). \end{cases}$$

Enfin, le nombre de particules est fixé à $\int dx \sum f_i = L$. La solution stationnaire de ces équations,

$$\begin{cases} f_{+a}(x) = \frac{v_b}{v_a + v_b} \left(1 - \frac{x}{L} + \frac{x}{L(L+1)} \right) \\ f_{-a}(x) = \frac{v_b}{v_a + v_b} \frac{L}{L+1} \left(1 - \frac{x}{L} \right) \\ f_{+b}(x) = \frac{v_a}{v_a + v_b} \frac{x}{L+1} \\ f_{-b}(x) = \frac{v_a}{v_a + v_b} \left(\frac{x}{L} + \frac{L-x}{L(L+1)} \right), \end{cases} \quad (9.5)$$

conduit à un courant dans l'état stationnaire

$$J = \frac{v_a v_b (v_a - v_b)}{2(L+1)},$$

qui correspond bien à une conduction normale : ainsi, la validité de l'équation de Boltzmann pour ce modèle entraîne celle de la loi de Fourier. Cette conclusion reste inchangée dans le cas, plus complexe, de la version gaussienne du modèle, où les réservoirs obéissent à (8.1) [61].

Anomalie des cumulants supérieurs du courant

Les résultats présentés ici sont le fruit d'une collaboration entre Éric Brunet (pour le gaz de bâtons durs), Joel Lebowitz (pour le modèle d'Ianaro-Lebowitz), Bernard Derrida et moi-même. Ils ont été publiés en 2010 dans *Europhysics Letters* [21] et dans le *Journal of Statistical Physics* [51]. Les mesures ci-dessous ont été réalisées à partir de mes propres données : elles ont été confirmées par celles effectuées, à l'aide de programmes indépendants, par Éric Brunet et Bernard Derrida.

10.1 Méthode de mesure des cumulants du courant

Nos travaux ont porté sur la simulation des systèmes suivants :

- un gaz de bâtons durs de masses alternées de masses 1 et $m_2 = 2.62$:
 - en géométrie ouverte entre deux réservoirs de températures $T_a = 2$ et $T_b = 1$, pour des tailles $51 \leq L \leq 801$;
 - en géométrie périodique à énergie constante $E = N$, pour des tailles $50 \leq 800$;
- un modèle d'Ianaro-Lebowitz en géométrie ouverte de taille $125 \leq L \leq 8000$:
 - entre deux réservoirs "à deux vitesses" (8.2) pour $v_a = 2$ et $v_b = 1$;
 - entre deux réservoirs gaussiens (8.1) aux températures $T_a = 4$ et $T_b = 1$.

Dans tous les cas, nous avons cherché à mesurer le comportement à temps long des quatre premiers cumulants du courant, Q_t , traversant le système à l'état stationnaire. Ce comportement ne devant, a priori, pas dépendre des détails de la mesure de Q_t (la position de la section S à travers laquelle Q_t est mesuré, par exemple), nous avons effectué sur tous les systèmes deux mesures différentes :

- nous avons mesuré la quantité d'énergie Q_t traversant une section S placée au milieu du système pendant un temps t ;

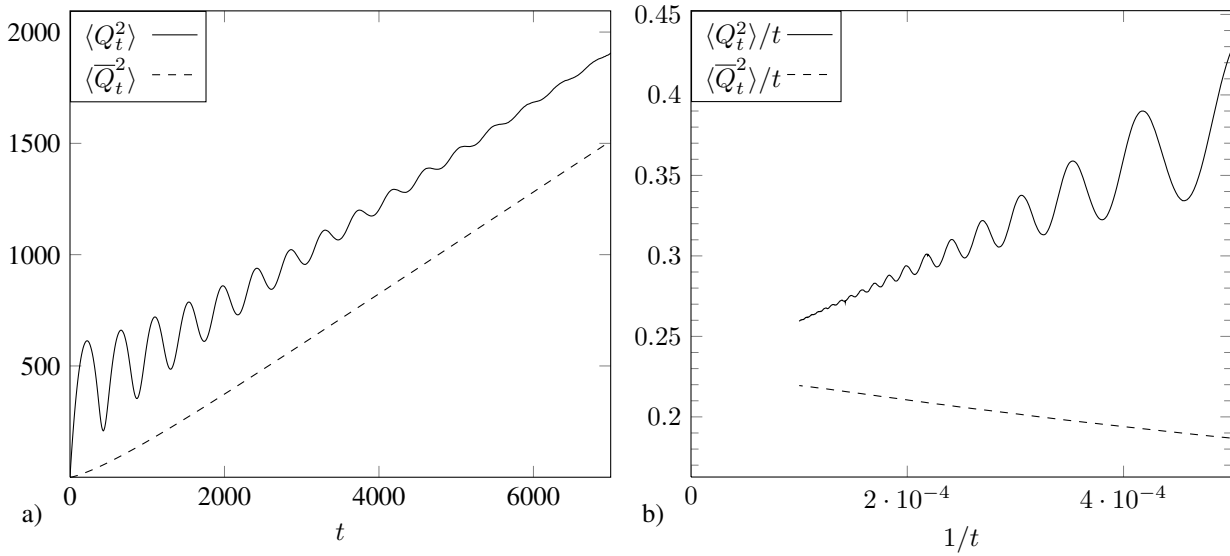


FIGURE 10.1 – Deuxième cumulant des deux mesures du flux d'énergie Q_t et \bar{Q}_t sur un gaz de $L = 801$ bâtons durs de masses alternées pour $0 \leq t \leq 8000$ (fig. 10.1a) entre deux réservoirs de température 1. Lorsque $t \rightarrow \infty$, les rapports $\langle Q_t^2 \rangle_c/t$ convergent vers une valeur commune proche de 0.23 (fig. 10.1b).

- nous avons intégré le flux d'énergie moyen dans le système, $F_s = \frac{1}{L} \sum \frac{1}{2} m_i v_{i,x}(s)^3$, et intégré celui-ci pendant un temps t pour obtenir le courant moyen \bar{Q}_t traversant le système pendant le temps t .

Nos simulations ont consisté à échantillonner Q_t et \bar{Q}_t , pendant un temps T dépendant de la taille du système, suffisamment de fois pour pouvoir calculer leurs quatre premiers cumulants : de 10^8 échantillons pour les systèmes les plus petits ($N \leq 50$) à 10^6 échantillons pour les systèmes les plus grands ($N \sim 10^3$).

Pour garantir que les mesures de Q_t et \bar{Q}_t soient prises dans l'état stationnaire (celui-ci étant inconnu dans tous les cas étudiés, à l'exception des systèmes à l'équilibre), les conditions initiales de nos échantillons sont choisies en donnant un état initial arbitraire au premier échantillon, puis en prenant pour état initial de chaque autre échantillon l'état final de l'échantillon précédent. Ce procédé limite l'influence du régime transiet (avant que le système converge vers l'état stationnaire) aux premiers échantillons : nous avons ensuite éliminé ceux-ci du calcul des cumulants, en ne considérant que les derniers 75% de l'ensemble des échantillons de chaque simulation.

Ces mesures nous ont permis d'observer que les cumulants $\langle Q_t^n \rangle_c$ et $\langle \bar{Q}_t^n \rangle_c$, pour $n \geq 2$, se comportent de la même manière dans tous les cas étudiés. La figure 10.1 illustre ce comportement dans le cas d'un gaz de bâtons durs entre deux réservoirs à la même température 1.

À temps court, $\langle Q_t^n \rangle_c$ et $\langle \bar{Q}_t^n \rangle_c$ se comportent très différemment : en particulier, $\langle Q_t^n \rangle_c$ présente des oscillations qui sont absentes de $\langle \bar{Q}_t^n \rangle_c$. Pour t suffisamment grand, les deux mesures tendent à croître linéairement avec t . De plus, en traçant $\langle Q_t^n \rangle_c/t$ en fonction de $1/t$, il apparaît que les deux mesures convergent vers une valeur commune, que nous

avons prise pour valeur asymptotique de $\langle Q_t^n \rangle_c / t$.

Ce phénomène de convergence de $\langle Q_t^n \rangle_c / t$ en fonction de $1/t$ nous a permis de choisir le temps T pendant lequel nous avons mesuré Q_t et \bar{Q}_t pour chaque échantillon. Remarquons que ce comportement se comprend simplement pour le deuxième cumulant $\langle Q_t^2 \rangle_c$: soit $C_L(t)$ la fonction d'autocorrélation du courant $J_t = \partial_t Q_t$ dans un système de taille L , telle que $\langle J(t_1)J(t_2) \rangle_c = C_L(t_1 - t_2)$ dans l'état stationnaire. Il est communément admis (voir 9.2.1) que $C_L(t)$ décroît rapidement après un temps t_{cutoff} dépendant de L : ainsi, le deuxième cumulant,

$$\langle Q_t^2 \rangle_c = \iint_0^t \langle J(t_1)J(t_2) \rangle_c dt_1 dt_2 = 2t \int_0^t C_L(\tau) d\tau - 2 \int_0^t \tau C_L(\tau) d\tau$$

devient de la forme $At + B$ pour $t \rightarrow \infty$, soit $\langle Q_t^2 \rangle_c / t \simeq A + B/t$.

10.2 Simulations numériques du gaz de bâtons durs et du modèle I-L en géométrie ouverte

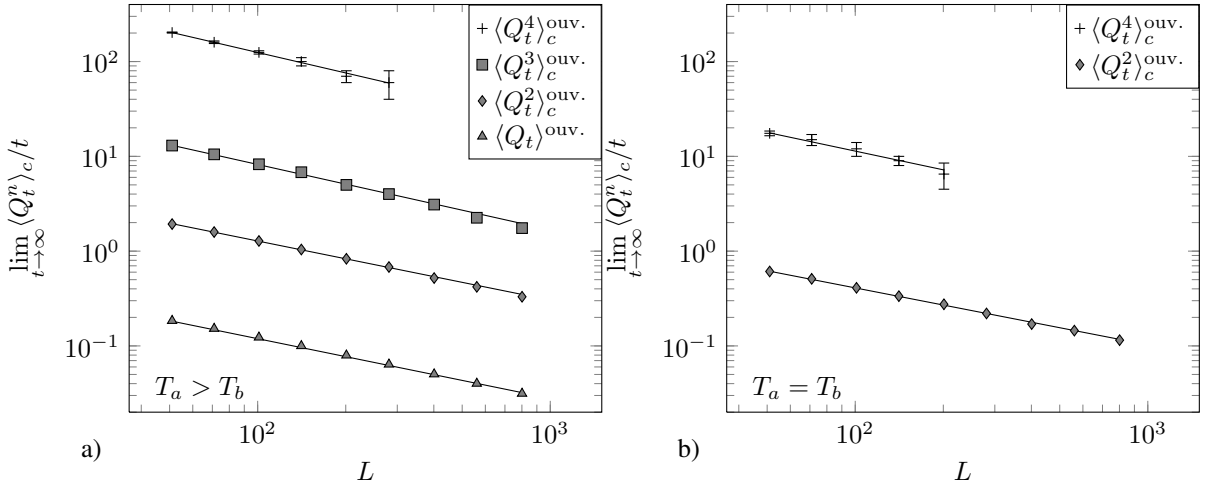


FIGURE 10.2 – Valeurs asymptotiques de $\langle Q_t^n \rangle_c / t$ pour un système ouvert de $51 \leq L \leq 801$ bâtons durs de masses 1 et 2.62, entre deux réservoirs de températures $T_a = 2$, $T_b = 1$ (fig. 10.2a) et $T_a = T_b = 1$ (fig. 10.2b). Tous les cumulants semblent décroître en $L^{\alpha-1}$ avec $0.28 \leq \alpha \leq 0.37$.

Nous avons mesuré les quatre premiers cumulants du courant Q_t dans les cas suivants :

- Un gaz de 51 à 801 bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62, placé entre des réservoirs aux températures $T_a = 2$ et $T_b = 1$ (fig. 10.2a) et $T_a = T_b = 1$ (fig. 10.2b) ;
- Un gaz de Ianiro-Lebowitz de 50 à 800 particules, placé entre deux réservoirs gaussiens aux températures $T_a = 2$ et $T_b = 1$ (fig. 10.3).

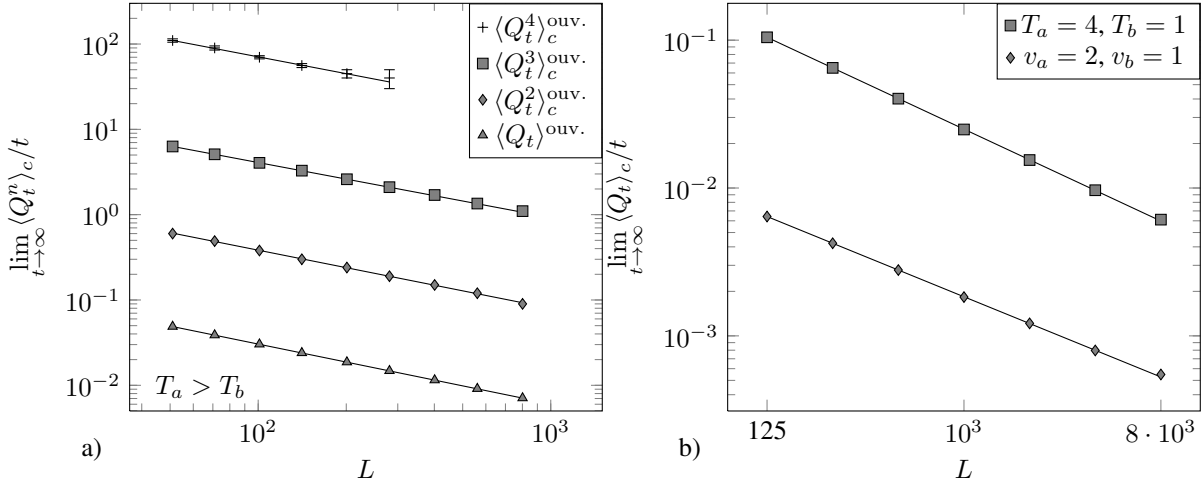


FIGURE 10.3 – Valeurs asymptotiques de $\langle Q_t^n \rangle_c / t$ pour un modèle d'Ianiro-Lebowitz gaussien (8.1) de $50 \leq L \leq 800$ particules, entre deux réservoirs de températures $T_a = 2$, $T_b = 1$ (fig. 10.3a). La figure 10.3b présente des mesures de $\langle Q_t \rangle / t$ pour des tailles $128 \leq 8000$, pour un modèle IL à deux vitesses (8.2) pour $v_a = 2$ et $v_b = 1$ ainsi que pour un modèle IL gaussien entre deux réservoirs aux températures $T_a = 4$ et $T_b = 1$. Tous les cumulants semblent décroître en $L^{1-\alpha}$ avec $0.3 \leq \alpha \leq 0.4$.

Ces mesures indiquent que tous les cumulants de Q_t présentent, dans tous les modèles, une loi de Fourier anormale (7.2) :

$$\frac{\langle Q_t^n \rangle_c}{t} \propto \frac{1}{L^{1-\alpha}}.$$

Le tableau ci-dessous résume les exposants α des anomalies que nous avons mesurées :

Modèle	Gaz de bâtons durs		Ianiro-Lebowitz		
	$T_a > T_b$	$T_a = T_b$	$T_a = 2$	$T_a = 4$	$v_a = 2$
$\langle Q_t \rangle / t$	0.37		0.30	0.40	0.322
$\langle Q_t^2 \rangle_c / t$	0.38	0.40	0.32		
$\langle Q_t^3 \rangle_c / t$	0.31		0.35		
$\langle Q_t^4 \rangle_c / t$	0.28	0.34	0.34		

La mesure du quatrième cumulant de Q_t est évidemment la plus difficile, et est la seule à posséder des barres d'erreurs appréciables. Cette mesure a déterminé les tailles accessibles à nos simulations, qui sont par conséquent notoirement plus petites que celles utilisées dans la littérature pour mesurer l'exposant anormal de $\langle Q_t \rangle$ (voir [54] et fig. 9.1).

Ces mesures indiquent que, en raison d'importantes effets de taille finie, il est impossible de déduire la valeur précise des exposants α des lois de Fourier anormales à partir de la gamme de tailles utilisée ici. Toutefois, nos travaux indiquent sans aucun doute que les premiers cumulants de Q_t suivent tous des lois de Fourier anormales dans les deux systèmes que nous avons étudiés. Les exposants que nous avons mesurés sont proches les uns des autres, et semblent compatibles avec la valeur $\alpha = 1/3$ qui fait consensus dans la littérature pour l'anomalie du courant moyen.

En particulier, le modèle d'Ianiri-Lebowitz présente une conduction anormale comparable aux autres modèles, bien que sa dynamique ne conserve pas l'impulsion : cette anomalie vient contredire la prédiction de l'équation de Boltzmann pour ce modèle (voir [61] et 9.4), indiquant que celle-ci n'est pas vérifiée dans l'état stationnaire. Afin de confirmer cette loi de Fourier anormale, nous avons mesuré $\langle Q_t \rangle / t$ pour des modèles d'Ianiri-Lebowitz des deux types (gaussien et à deux vitesses) jusqu'à $L = 8000$ (fig. 10.3b) : ces mesures supplémentaires confirment l'existence d'une loi de Fourier anormale.

10.3 Simulations en géométrie périodique et dépendance de l'anomalie en les conditions au bord

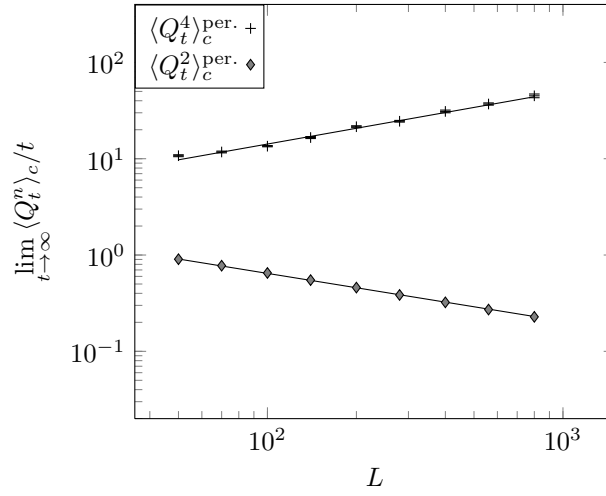


FIGURE 10.4 – Cumulants pairs de Q_t dans un système périodique de 50 à 800 bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62. $\langle Q_t^2 \rangle_c / t$ décroît anormalement, avec un exposant α proche de $1/2$: en revanche, $\langle Q_t^4 \rangle_c / t$ augmente avec L .

Nous avons mesuré les deuxième et quatrième cumulants du courant Q_t à travers des systèmes périodiques de taille $50 \leq L \leq 800$, pour un gaz de bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62 placé dans l'ensemble microcanonique d'énergie totale $E = L$ et d'impulsion totale $P = 0$ (figure 10.4).

Comme discuté en 8.2.1, le choix d'un ensemble microcanonique est nécessaire car, en l'absence de réservoirs, la conservation de l'énergie et de l'impulsion totale brise l'ergodicité de la dynamique sur l'ensemble canonique.

Remarquons que ces mêmes considérations d'ergodicité empêchent d'étudier le modèle d'Ianiri-Lebowitz en conditions périodiques. En effet, dans ce cas, le modèle conserve l'ensemble des valeurs absolues des vitesses des particules : il est donc difficile de s'assurer de son ergodicité.

Contrairement aux systèmes ouverts présentés ci-dessus, le système périodique de la figure 10.4 obéit à des lois de Fourier anormales d'exposants très différents selon les cumulants : alors que $\langle Q_t^2 \rangle_c / t$ décroît apparemment en $1/\sqrt{L}$, $\langle Q_t^4 \rangle_c / t$ semble au contraire croître en \sqrt{L} .

10.4 Comportement des cumulants à des temps intermédiaires

Nous revenons dans cette section à l'évolution temporelle de $\langle Q_t^n \rangle_c$ observée dans la figure 10.1 : comme dans cette figure, nous nous concentrons sur le cas d'un gaz de bâtons durs de taille L placé entre deux réservoirs à la même température $T_a = T_b = 1$.

10.4.1 Comportement à temps court et système infini

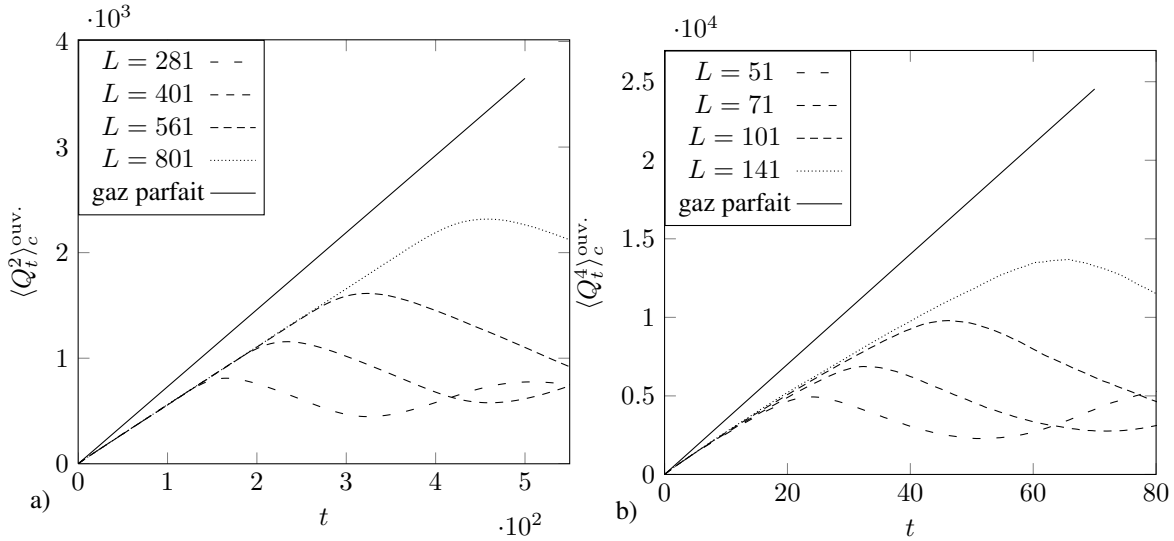


FIGURE 10.5 – Cumulants pairs de Q_t dans un système de 281 à 801 (10.5a) ou de 51 à 141 (10.5b) bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62 entre deux réservoirs à la température 1 pour des temps t d'ordre 1. Les cumulants croissent linéairement avec t pendant un temps de plus en plus grand : cette croissance linéaire peut se comparer à celle que suivent les cumulants dans un gaz parfait infini (10.1).

Pour des temps t d'ordre 1 (figure 10.5), $\langle Q_t^n \rangle_c$ devient indépendant de L pour L assez grand : on peut ainsi mesurer le courant à travers une section d'un système infini de particules à la même température, qui serait pour ce problème l'analogue des systèmes diffusifs infinis étudiés dans la partie I. On peut ainsi remarquer que, pour un tel système,

$$\langle Q_t^n \rangle_c^{\text{inf.}} \propto t,$$

alors que l'on s'attendrait à $\langle Q_t^n \rangle_c \propto \sqrt{t}$ dans un système diffusif. Cette croissance linéaire est remarquablement proche de celle que l'on observerait si le système était un gaz parfait (voir figure 10.5), c'est à dire si les particules n'interagissaient pas : nous avons calculé ci-dessous l'expression des cumulants dans ce cas.

Considérons un gaz infini 1D de plusieurs espèces i de particules de masses m_i à la densité particulaire n_i , thermalisé à la température inverse β : la probabilité qu'une particule i soit présente à la position x à dx près et ait la vitesse v à dv près est donnée

par

$$n_i \sqrt{\frac{\beta m_i}{2\pi}} e^{-\beta/2 m_i v^2} dx dv.$$

Mesurons Q_t en comptant l'énergie des particules qui traversent la position $x = 0$ entre les instants 0 et t . Une particule i , partie de x à la vitesse v , traversera $x = 0$ positivement (contribuant $+\frac{1}{2}m_i v^2$ à Q_t) si $v > 0$ et $-vt \leq x \leq 0$; en revanche, elle traversera $x = 0$ dans le sens négatif (contribuant $-\frac{1}{2}m_i v^2$ à Q_t) si $v < 0$ et $0 \leq x \leq -vt$. Ainsi, les mouvements des particules étant indépendants les uns des autres, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \prod_{i,x,v} \left[n_i \sqrt{\frac{\beta m_i}{2\pi}} e^{-\frac{\beta}{2} m_i v^2} dx dv (e^{\frac{\lambda}{2} m_i v^2} \mathbf{1}_{\{-vt \leq x \leq 0\}} + e^{-\frac{\lambda}{2} m_i v^2} \mathbf{1}_{\{0 \leq x \leq -vt\}} + \mathbf{1}_{x \notin [-vt, 0]}) \right. \\ \left. + \left(1 - n_i \sqrt{\frac{\beta m_i}{2\pi}} e^{-\frac{\beta}{2} m_i v^2} dx dv \right) \right] \end{aligned}$$

où $\mathbf{1}_{x \in E}$ vaut 1 si $x \in E$ et 0 sinon. Par conséquent,

$$\begin{aligned} \log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle &= \sum_i \iint \log \left[1 + n_i \sqrt{\frac{\beta m_i}{2\pi}} e^{-\frac{\beta}{2} m_i v^2} dx dv \mathbf{1}_{x \in [-vt, 0]} (e^{\frac{\lambda}{2} m_i v^2} - 1) \right] \\ &= \sum_i \iint dx dv n_i \sqrt{\frac{\beta m_i}{2\pi}} e^{-\frac{\beta}{2} m_i v^2} \mathbf{1}_{x \in [-vt, 0]} (e^{\frac{\lambda}{2} m_i v^2} - 1) \\ &= t \sum_i n_i \sqrt{\frac{2}{\pi \beta m_i}} \frac{\lambda^2}{\beta^2 - \lambda^2}. \end{aligned}$$

Nous aboutissons donc à $\langle Q_t^n \rangle_c = 0$ pour n impair et à

$$\langle Q_t^n \rangle_c = t \frac{n!}{\beta^n} \sum_i n_i \sqrt{\frac{2}{\pi \beta m_i}} \text{ pour } n \text{ pair.} \quad (10.1)$$

Le gaz de bâtons durs est constitué de deux espèces, de masses 1 et $m_2 = 2.62$, de densités particulières 1/2 : dans les conditions de la figure 10.5, l'énergie moyenne par particule $\varepsilon = \langle \frac{1}{2} m_i v^2 \rangle$ est égale à 1, soit $\beta = 1/2$. (10.1) prédit alors des coefficients de croissance linéaire remarquablement proches de ceux que nous avons observés dans le gaz réel.

10.4.2 Oscillations de $\langle Q_t^2 \rangle_c$ et ondes sonores

La figure 10.6 montre que, pour t de l'ordre de L , $\langle Q_t^2 \rangle_c$ oscille avec une période proportionnelle à L , l'amortissement de ces oscillations diminuant avec L . Leur période peut être comparée à la vitesse du son adiabatique dans le gaz de bâtons durs :

$$c_s = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}.$$

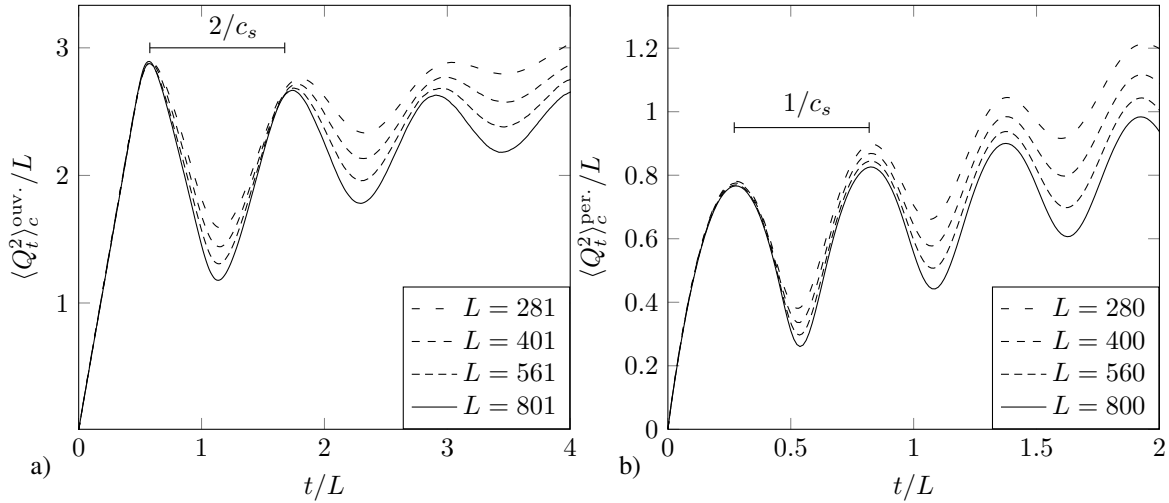


FIGURE 10.6 – Deuxième cumulant de Q_t dans un système de 280 à 800 bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62, placés entre deux réservoirs de température 1 (fig. 10.6a) ou en conditions aux bords périodiques (fig. 10.6b). La période des oscillations semble être de $2L/c_s$ dans le cas ouvert et de L/c_s dans le cas périodique.

Ici, $\gamma = 3$ pour un gaz monoatomique 1D, $P = nkT = 2$ (la densité de particules vaut 1, et l'énergie moyenne par particule vaut $\varepsilon = kT/2 = 1$) et $\rho = (1 + m_2)/2$, soit $c_s = 1.82$.

La période des oscillations de la figure 10.6a semble être de $2L/c_s$: elle correspond au temps mis par une fluctuation issue de la section S (où est mesuré Q_t) à revenir en S dans sa direction de départ, après s'être réfléchiée une fois sur chaque réservoir. En revanche, la période des oscillations de la figure 10.6b est apparemment de L/c_s , soit le temps mis par une fluctuation issue de S à y revenir après avoir accompli un tour du cercle.

Corrélations anormales des champs de vitesse et d'énergie

Les mesures numériques de courant présentées en 10.2 montrent que le modèle d'Ianaro-Lebowitz suit une loi de Fourier anormale, contredisant en cela les prédictions de l'équation de Boltzmann (voir 9.4) pour ce modèle.

Dans un article publié avec J. Lebowitz dans le *Journal of Statistical Physics* [51], nous avons étudié plus en détail les causes de cette violation : ceci nous a permis de mettre en évidence, dans le gaz de bâtons durs ainsi que dans le modèle d'Ianaro-Lebowitz, la présence de corrélations importantes dans l'état stationnaire des systèmes ouverts. Ces corrélations, qui semblent s'établir sur une échelle intermédiaire entre les échelles microscopique et macroscopique du système, ne peuvent être négligées pour aboutir à l'équation de Boltzmann.

11.1 Violation de l'équation de Boltzmann par le modèle d'Ianaro-Lebowitz

Nous avons tout d'abord cherché à quantifier l'écart du modèle d'Ianaro-Lebowitz aux prédictions de l'équation de Boltzmann dans l'état stationnaire. Pour cela, nous avons étudié numériquement un modèle I.-L. à deux vitesses, $v_a = 2$ et $v_b = 1$ (8.2) : dans ce cas, l'équation de Boltzmann se résout simplement et prédit (voir 9.4) que les quatre densités partielles de particules de vitesses $\pm v_a$, sont des fonctions affines de x dans l'état stationnaire.

Nous avons donc mesuré les profils de densité $\langle \rho_L(x) \rangle$ et d'énergie $\langle \varepsilon_L(x) \rangle$ de systèmes de taille $2 \times 10^3 \leq L \leq 8 \times 10^3$ dans l'état stationnaire. Pour cela, nous avons subdivisé le segment $[0, L]$ en un nombre fixe $P = 200$ de segments de taille L/P : nous avons ensuite mesuré le nombre de particules et l'énergie présents dans chacun de ces segments en comptabilisant les entrées et sorties de particules à leurs extrémités, puis intégré le résultat dans le temps pour obtenir $\langle \rho_L(x) \rangle$ et $\langle \varepsilon_L(x) \rangle$.

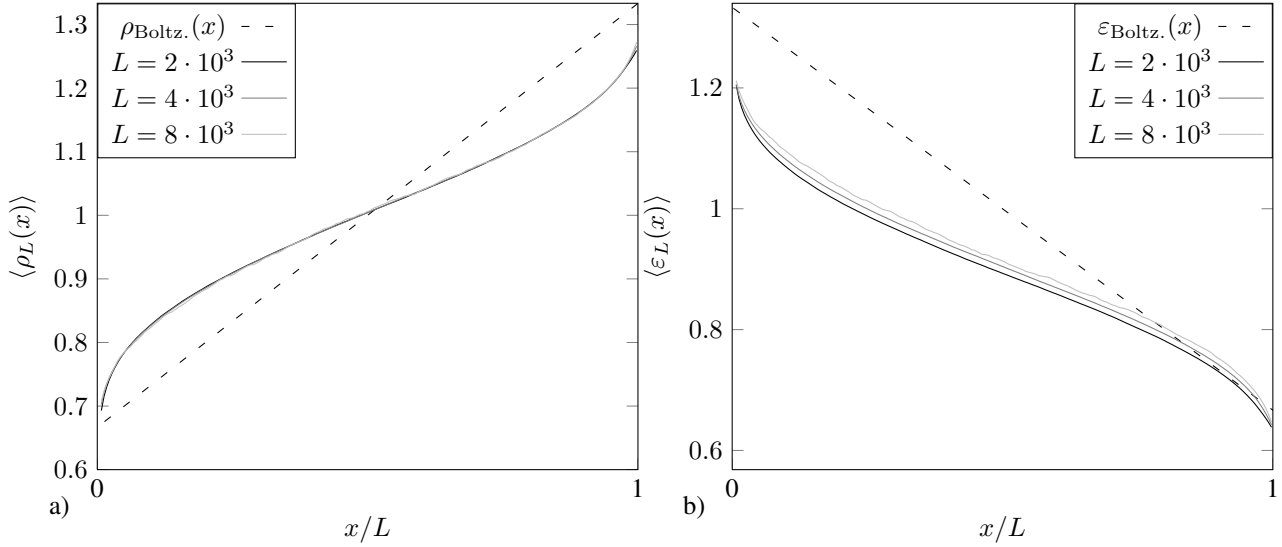


FIGURE 11.1 – Comparaison des profils de densité (fig. 11.1a) et d'énergie (fig. 11.1b) de modèles d'Ianiri-Lebowitz à deux vitesses $v_a = 2$ et $v_b = 1$ (8.2) de tailles $2 \times 10^3 \leq L \leq 8 \times 10^3$ aux prédictions de l'équation de Boltzmann (11.1).

Les prédictions de l'équation de Boltzmann(9.5) donnent, pour $L \rightarrow \infty$,

$$\begin{cases} \rho_{\text{Boltz.}}(x) = \frac{2}{v_a + v_b} \left(v_b + (v_a - v_b) \frac{x}{L} \right) \\ \varepsilon_{\text{Boltz.}}(x) = \frac{v_a v_b}{v_a + v_b} \left(v_a + (v_b - v_a) \frac{x}{L} \right) \end{cases} \quad (11.1)$$

La figure 11.1 compare ces prédictions aux mesures numériques. Les profils $\langle \rho_L(x) \rangle$ et $\langle \varepsilon_L(x) \rangle$ ne semblent pas converger vers $\rho_{\text{Boltz.}}(x)$ et $\varepsilon_{\text{Boltz.}}(x)$ pour $L \rightarrow \infty$: au contraire, leurs valeurs limites, $\rho_\infty(x)$ et $\varepsilon_\infty(x)$ s'en écartent notablement.

11.2 Croissance de corrélations à une échelle mésoscopique

Nous nous intéressons ici aux causes de la violation de l'équation de Boltzmann par le modèle d'Ianiri-Lebowitz. Pour un système de N particules interagissant à travers des collisions binaires, comme un gaz de bâtons durs ou le modèle I-L, l'évolution de la fonction de distribution $f(x, v, t)$ obéit à une équation exacte mais non fermée, qui constitue le premier ordre de la hiérarchie BBGKY :

$$\partial_t f(x, v, t) + v \partial_x f(x, v, t) = \int_{v', v' \rightarrow w, w'} dv' (v - v') [g_2((x, w, t), (x, w', t)) - g_2((x, v, t), (x, v', t))]$$

où $g_2((x, v, t), (x', v', t))$ est la fonction de distribution à deux points du système. L'équation de Boltzmann se déduit de cette équation en introduisant la troncature

$$g_2((x, v, t), (x, v', t)) \simeq f(x, v, t) f(x, v', t),$$

qui revient à négliger l'influence des corrélations à deux points dans g_2 : le non-respect de l'équation de Boltzmann dans l'état stationnaire du modèle d'Ianaro-Lebowitz nous a donc conduit à nous intéresser à ces corrélations.

Nous avons choisi de mesurer numériquement, pour le modèle d'Ianaro-Lebowitz ainsi que pour un gaz de bâtons durs, les corrélations à deux points du champ d'impulsion $p_L(x)$. En effet, le flux de particules dans l'état stationnaire étant nul (à cause du choix des couplages aux réservoirs), $p_L(x)$ est en moyenne nul, soit $\langle p_L(x) \rangle = 0$: ceci a facilité la mesure des fonctions de corrélations $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$.

La présence de corrélations à longue portée est une caractéristique bien connue des états stationnaires hors d'équilibre. Pour un système diffusif (tel un processus d'exclusion), ces corrélations prennent la forme d'échelle

$$\langle A(x_1) \dots A(x_n) \rangle_c \simeq \frac{1}{L^{n-1}} F\left(\frac{x_1}{L}, \dots, \frac{x_n}{L}\right)$$

(pour une observable $A(x)$ locale telle que l'énergie ou la densité). Nous avons donc étudié l'évolution avec L de la quantité $L\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$, pour un modèle d'Ianaro-Lebowitz entre réservoirs gaussiens (fig. 11.2) ou à deux vitesses (fig. 11.3), ainsi que pour un gaz de bâtons durs (fig. 11.4), pour des tailles L comprises entre 100 et 400.

Dans tous les cas, il apparaît que les corrélations $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$ décroissent, au moins à courte portée, plus lentement que $1/L$: ces corrélations, négatives du côté du réservoir le plus chaud et positives du côté du réservoir le plus froid, semblent néanmoins ne présenter cette croissance anormale que sur des régions de taille de plus en plus petite à l'échelle du système.

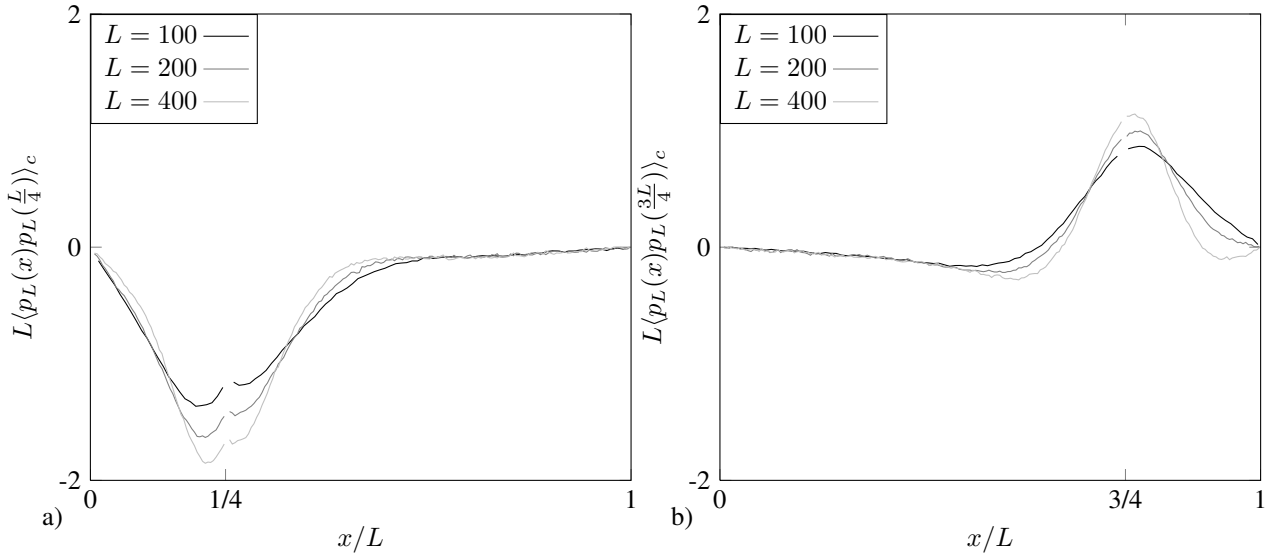


FIGURE 11.2 – Corrélations stationnaires d'impulsion $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$ dans un modèle d'Ianaro-Lebowitz gaussien (8.1), aux températures $T_a = 4$ et $T_b = 1$, de taille $100 \leq L \leq 400$, pour $y = L/4$ (fig. 11.2a) et $y = 3L/4$ (fig. 11.2b).

Dans le cas du gaz de bâtons durs, il nous a été possible de mesurer les corrélations dans des systèmes d'un ordre de grandeur plus grands, $1000 \leq L \leq 4000$, ce modèle

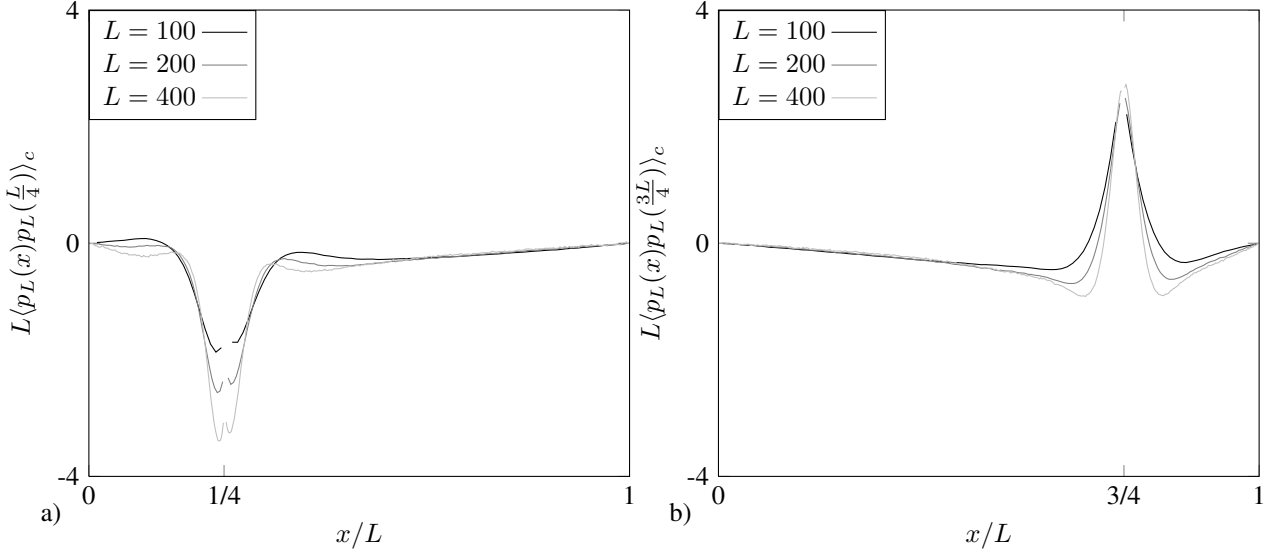


FIGURE 11.3 – Corrélations stationnaires d'impulsion $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$ dans un modèle d'Ianiri-Lebowitz à deux vitesses (8.2) $v_a = 2$ et $v_b = 1$, de taille $100 \leq L \leq 400$, pour $y = L/4$ (fig. 11.3a) et $y = 3L/4$ (fig. 11.3b).

ayant la caractéristique d'atteindre son état stationnaire nettement plus rapidement que le modèle d'Ianiri-Lebowitz. Pour ces tailles (fig. 11.5), nos mesures de $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$ sont compatibles avec une forme d'échelle du type

$$\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c \simeq \frac{1}{L^\beta} F_y \left(\frac{x-y}{L^\beta} \right).$$

avec $\beta \simeq 0.6$. Ainsi, la croissance anormale de ces corrélations se produirait à une échelle mésoscopique $|x-y| \sim L^{0.6}$, petite devant l'échelle macroscopique ($|x-y| \sim L$) des corrélations d'un système diffusif.

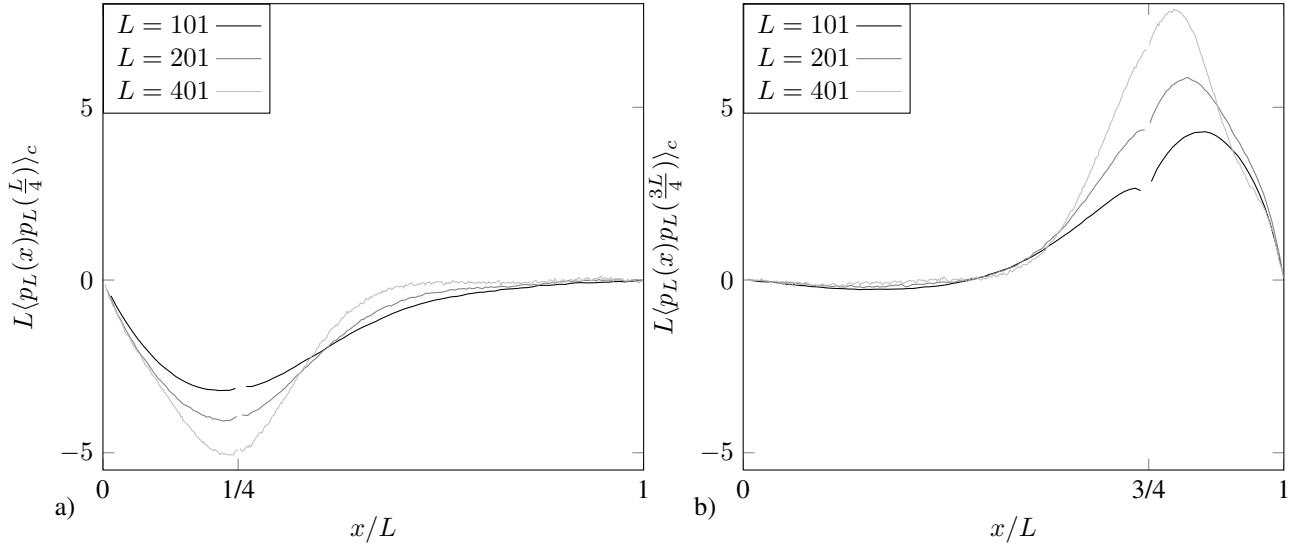


FIGURE 11.4 – Corrélations stationnaires d'impulsion $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$ dans un gaz de bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62 entre deux réservoirs de températures $T_a = 4$ et $T_b = 1$, de taille $101 \leq L \leq 401$, pour $y = L/4$ (fig. 11.4a) et $y = 3L/4$ (fig. 11.4b).

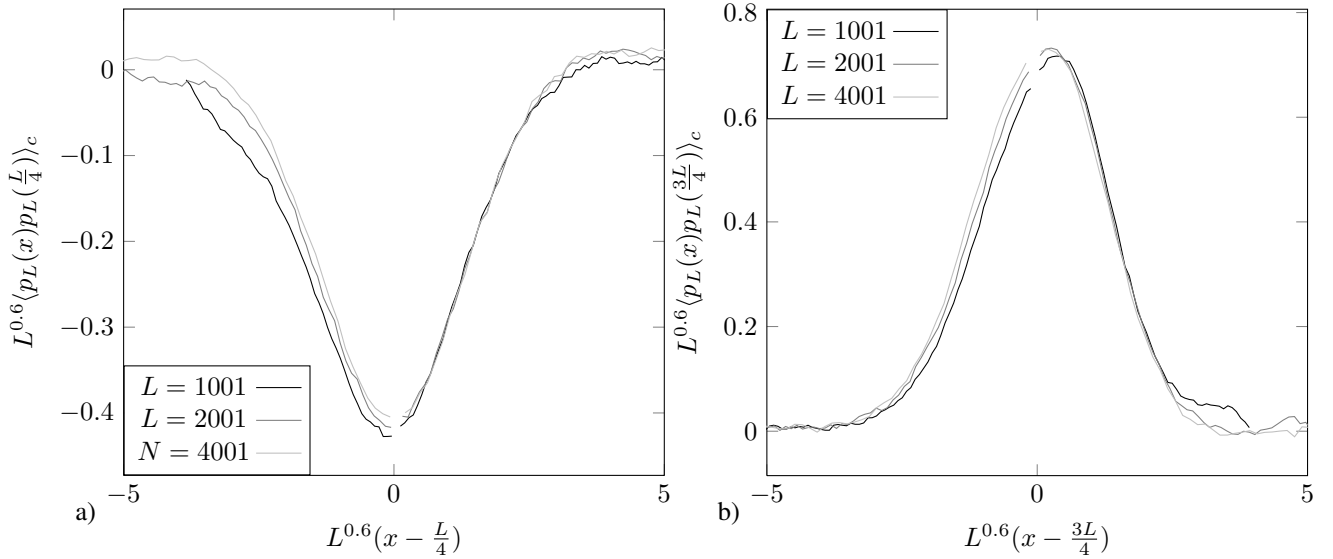


FIGURE 11.5 – Forme d'échelle des corrélations stationnaires d'impulsion $\langle p_L(x)p_L(y) \rangle_c$ dans un gaz de bâtons durs de masses alternées 1 et 2.62 entre deux réservoirs de températures $T_a = 4$ et $T_b = 1$, de taille $1001 \leq L \leq 4001$, pour $y = L/4$ (fig. 11.4a) et $y = 3L/4$ (fig. 11.4b).

Perspectives

Dans cette partie, nous nous sommes intéressés au non-respect de la loi de Fourier par les systèmes mécaniques 1D conservant l'impulsion. Il est connu que, dans ces systèmes, le flux d'énergie moyen entre deux réservoirs de températures différentes décroît plus lentement que l'inverse de la taille L du système les séparant : nous avons généralisé cette loi de Fourier anormale en étendant cette étude aux fluctuations de courant. Nous avons pu observer que les quatre premiers cumulants se comportent aussi de manière anormale (chapitre 10).

De plus, à travers l'étude des cumulants pairs, nous avons pu comparer les effets de conditions aux bords différentes, ouvertes (segment entre deux réservoirs) ou périodiques (système sur un cercle). Nous avons pu constater que le comportement avec L des cumulants, caractérisée par l'exposant α de leurs lois de Fourier anormales, dépend fortement de ces conditions aux bords : alors que les cumulants semblent tous décroître avec la même puissance de L dans le cas ouvert (section 10.2), ils semblent croître de plus en plus vite avec L en géométrie périodique (section 10.3).

Pour pouvoir mesurer les cumulants, nous avons dû accumuler nettement plus de statistiques que dans la plupart des études de la littérature consacrées à la mesure du seul courant moyen : par conséquent, les tailles de systèmes que nous avons considérées sont d'un ordre de grandeur plus petites que celles atteintes dans, par exemple, [54]. Ces études montrent clairement que, aux tailles que nous avons considérées, d'importants effets de taille finie subsistent : nos simulations sont donc insuffisantes pour déterminer avec précision les exposants des lois anormales des cumulants. Cette tâche demanderait un effort numérique qui demeure hors de portée des moyens numériques à notre disposition.

Les approches théoriques existantes, décrites dans la section 9.2, ne sont pas en mesure de prédire le comportement des cumulants. De fait, les fluctuations de courant que nous avons observées rappellent celles qui ont pu être calculées pour certains modèles de gaz sur réseau, comme l'exclusion asymétrique (ASEP) : le point commun entre ces systèmes pourrait être leur appartenance à la classe d'universalité KPZ [66]. Des travaux récents [102] sur les systèmes conservant l'impulsion tendent à confirmer cette hypothèse.

Nous avons également mesuré les fluctuations de courant dans un modèle de gaz de bâtons durs simplifié, dit d'Ianiri-Lebowitz (section 8.3), ne conservant pas l'impulsion. Pour ce modèle, l'équation de Boltzmann peut se résoudre exactement et prédit que la

loi de Fourier est vérifiée : les résultats de nos simulations indiquent au contraire que les cumulants du courant décroissent anormalement avec L comme dans les modèles conservant l'impulsion, suggérant que l'équation de Boltzmann n'est pas valide.

Nous avons montré numériquement, dans le chapitre 11, que cette violation s'accompagne d'une croissance anormale des corrélations d'énergie dans l'état stationnaire du modèle I-L, ainsi que dans le gaz de bâtons durs. Or, il est nécessaire de négliger ces corrélations pour pouvoir établir l'équation de Boltzmann : nous avons donc déterminé une cause probable de cet écart.

Ainsi, nous avons pu cerner plusieurs caractéristiques qu'une théorie de la conduction anormale devrait satisfaire : divergences des cumulants du courant différentes selon les conditions aux bords et prise en compte de corrélations importantes. Le parallèle avec le modèle *ABC*, qui fait l'objet de la partie suivante, est prometteur : ce modèle présente de nombreuses propriétés similaires, que nous avons pu déterminer théoriquement. La 'boîte à outils' que nous avons eu l'occasion de développer en analysant ce modèle (l'identification de modes "lents" satisfaisant une équation effective simplifiée) pourra peut-être contribuer à notre compréhension des systèmes mécaniques.

Troisième partie

Fluctuations de courant anormales dans le modèle ABC

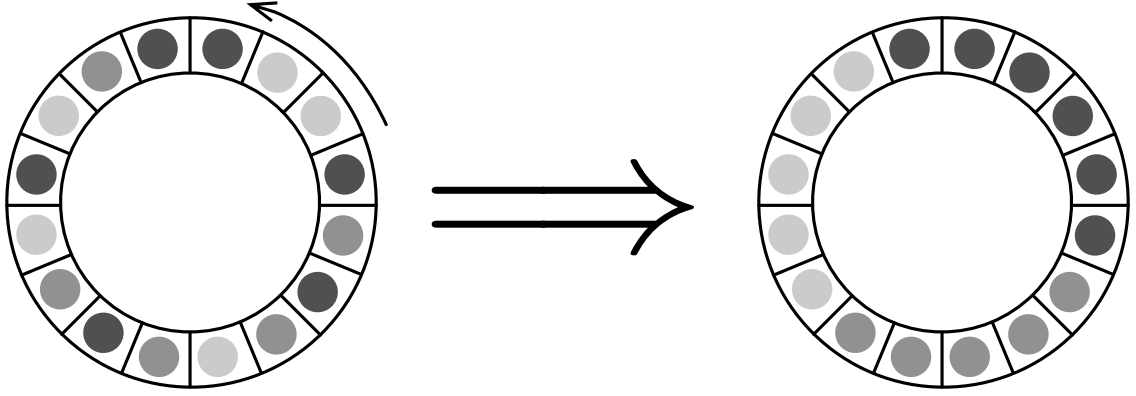


FIGURE 12.1 – Modèle ABC sur un cercle de L sites. Chaque site est occupé par une particule de type A , B ou C : les règles d'échange entre sites voisins (12.1) favorisent l'émergence de configurations où les trois espèces se suivent.

Cette dernière partie est consacrée à l'étude d'un système, le modèle ABC , qui consiste en un gaz sur réseau conservant deux quantités : il se rapproche en cela des systèmes diffusifs qui font l'objet de la première partie de cette thèse. Introduit initialement par Evans, Kaffri, Koduvely et Mukamel à la fin des années 1990 [44] dans le cadre de l'étude des transitions de phase dynamiques, il a par la suite été rattaché par Fayolle et Furthlener [45–47] au problème de la déformation stochastique des marches aléatoires sur réseau triangulaire.

Dans ce modèle, chaque site d'un réseau unidimensionnel est initialement occupé par une particule de type A , B ou C : puis, les sites voisins échangent leurs particules aléatoirement selon les taux

$$\begin{aligned} AB &\xrightleftharpoons[1]{q} BA \\ BC &\xrightleftharpoons[1]{q} CB \\ CA &\xrightleftharpoons[1]{q} AC \end{aligned} \quad \text{avec } q \leq 1. \quad (12.1)$$

L'introduction de trois espèces permet de donner aux taux une symétrie cyclique sans les rendre triviaux, ce qui serait impossible dans un modèle à une quantité conservée. L'asymétrie tend à favoriser les configurations 'ordonnées' où les trois espèces sont séparées, de la forme $AA..AB..BBC..CC$. Lorsque la taille L du système tend vers l'infini pour une asymétrie $q < 1$ fixée, ces configurations sont les états stationnaires du système [43].

La situation est plus complexe lorsque l'asymétrie diminue avec L comme

$$q = e^{-\beta/L}. \quad (12.2)$$

Le modèle exhibe alors une transition de phase : l'état stationnaire reste le même que pour $\beta = 0$, $q = 1$ tant que β reste suffisamment petit, mais commence à se ségréger dès que β franchit une valeur critique β_c . Comme nous le verrons dans la partie 13.1,

cette transition d'une phase plate (désordonnée) vers une phase partiellement séparée (modulée) peut être discontinue (du premier ordre) ou continue (du second ordre), selon les proportions de particules A , B et C dans le système. Les propriétés de la transition, telle la valeur de β_c , ne sont connues précisément que dans ce second cas.

Avec Bernard Derrida, je me suis intéressé au comportement du modèle ABC , considéré sur un réseau périodique de L sites, au voisinage de la transition du second ordre. À partir de la théorie macroscopique des fluctuations (section 13.2), nous avons montré qu'il existe un régime critique dans lequel l'évolution du système est dominée par celle du premier mode de Fourier des densités de particules A , B et C : nous avons établi pour celui-ci une équation effective d'évolution (section 14), qui prend la forme d'une équation de Langevin amortie dans un potentiel quartique.

À partir de cette théorie effective, nous avons pu montrer que, dans le régime critique, le comportement du modèle ABC s'écarte de celui d'un système diffusif, tels ceux traités dans la partie 1, pour se rapprocher des systèmes anormaux de la partie 2. Les fluctuations du courant de particules à travers le système, qui obéissent à la loi de Fourier loin du point critique (à la fois dans la phase plate et dans la phase modulée) deviennent anormales près de celui-ci : nous avons prédit, et mesuré, une anomalie du courant $Q_A(t)$ de particules A entre les temps 0 et t de la forme (section 16)

$$\frac{\langle Q_A(t)^n \rangle_c}{t} \simeq \frac{A_n}{L} + \frac{B_n}{L^{5/2-n}}. \quad (12.3)$$

Cette croissance de plus en plus rapide des cumulants avec L n'est pas sans rappeler celle que nous avons mesurée numériquement dans des systèmes mécaniques (section 10.3). Afin de la confirmer, nous avons calculé, par des méthodes différentes, les coefficients des loi de Fourier normales auxquelles ces cumulants obéissent hors du point critique (section 17) : le comportement de ces coefficients, qui divergent à l'approche de la transition, est en accord avec nos prédictions pour le régime critique (12.3).

Notre théorie effective nous a également permis de prédire le comportement des fonctions de corrélation, spatiales et temporelles, du modèle ABC près du point critique : ces fonctions présentent également une décroissance anormale, que nous avons pu vérifier numériquement (section 15).

Enfin, nous nous sommes intéressés, dans la section 18, au comportement du système au niveau de la ligne tricritique (figure 13.1) séparant les régions où la transition est du premier ou du second ordre. Sur cette ligne, la théorie effective au point critique est modifiée, et conduit à une anomalie des cumulants différente :

$$\frac{\langle Q_A(t)^n \rangle_c}{t} \simeq \frac{A_n}{L} + \frac{B_n}{L^{4(2-n)/3}}.$$

De même, les exposants de l'anomalie des fonctions de corrélations sont modifiées. L'exposant de la loi de Fourier anormale ne semble donc pas être une caractéristique constitutive du modèle (liée à une éventuelle "classe d'universalité", comme cela a pu être proposé pour les modèles mécaniques).

Résultats connus sur le modèle ABC

13.1 Énergie libre et transition de phase

Le modèle ABC a été introduit en 1998 par Evans, Kaffri, Koduvely et Mukamel [44] comme un exemple de système unidimensionnel présentant une transition de phase bien que sa dynamique (les taux de transition (12.1)) soit locale. Ce modèle se démarque ainsi des systèmes dont les interactions sont locales, comme les modèles d'Ising et de Potts, pour lesquels un argument simple prédit qu'ils ne peuvent subir de transition de phase en dimension 1.

[44] résout ce paradoxe apparent en montrant que les taux de transition locaux du modèle ABC entraînent l'émergence d'interactions à longue portée, comparables à celles présentes dans un modèle en champ moyen. Considérons un segment isolé de L particules : les taux de transition (12.1) conservant le nombre de particules de chaque espèce, les nombres de particules de chaque espèce, N_A , N_B et N_C (tels que $N_A + N_B + N_C = L$) sont conservés. [44] établit que les taux de transition satisfont au bilan détaillé (1) pour la loi d'équilibre

$$\mathbb{P}_{\text{eq.}}[\mathcal{C}] = \exp \left[-\beta \sum_{k=1}^L \sum_{l=k+1}^L (C_k B_l + A_k C_l + B_k A_l) \right] \quad (13.1)$$

où

$$A_k = \begin{cases} 1 & \text{si le site } k \text{ est de type } A \text{ dans la configuration } \mathcal{C} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Dans le cas d'un cercle de L sites, le choix (13.1) ne satisfait plus, la relation de bilan détaillé pour des échanges de particules entre le site 1 et le site L : de fait, le modèle ABC sur le cercle est dans le cas général un système hors d'équilibre. Toutefois, dans le cas particulier $N_A = N_B = N_C$ où les densités des trois types de particules sont égales, la définition (13.1) de $\mathbb{P}_{\text{eq.}}$ devient indépendante du choix du site 1 sur le cercle, de telle sorte que le bilan détaillé est satisfait : ainsi, la loi d'équilibre (13.1) s'applique, outre au segment fermé, à la géométrie circulaire lorsque $N_A = N_B = N_C$.

Par des considérations microscopiques, Evans et al. ont montré l'existence d'une transition de phase sur le cercle, pour $N_A = N_B = N_C$, lorsque le paramètre β , qui joue

dans (13.1) le rôle d'une température inverse, augmente. Clincy, Derrida et Evans [23] ont par la suite déterminé la valeur critique β_c à laquelle cette transition se produit en reformulant (13.1) en termes macroscopiques. Définissons pour chaque espèce $a \in \{A, B, C\}$ un profil de densité macroscopique $\rho_a(x)$ par

$$\mathbb{P}_{\text{eq.}}[\text{particule } A \text{ en } k] = \langle A_k \rangle \simeq \rho_A(k/L). \quad (13.2)$$

Les profils $\rho_a(x)$ satisfont à deux conditions, issues des lois de conservation microscopiques :

$$\begin{cases} \rho_A(x) + \rho_B(x) + \rho_C(x) = 1 \\ \int_0^1 dx \rho_a(x) = \frac{N_a}{L} \equiv r_a. \end{cases}$$

La loi d'équilibre (13.1) peut alors se mettre sous la forme d'un principe de grandes déviations sur les profils $\rho_a(x)$:

$$\mathbb{P}_{\text{eq.}} \propto e^{-L\mathcal{F}[\rho_a]} \quad (13.3)$$

avec

$$\mathcal{F}[\rho_a] = \int_0^1 dx \sum_a \rho_a(x) \log \rho_a(x) + \beta \int_0^1 dx \int_0^1 dz \sum_a z \rho_a(x) \rho_b(x+z)$$

où les sommes courent sur l'indice $a \in \{A, B, C\}$ et où b dénote l'indice de l'espèce suivant immédiatement a .

Lorsque β est petit, les profils plats $\rho_a(x) = r_a = 1/3$ sont des minima locaux de $\mathcal{F}[\rho_a]$. Clincy et al. ont montré que ces profils constants deviennent localement instables lorsque β dépasse

$$\beta_* = 2\pi\sqrt{3} :$$

ainsi, la phase plate $\rho_a(x) = r_a$, qui constitue l'unique minimum de $\mathcal{F}[\rho_a]$ lorsque $\beta = 0$, devient localement instable pour $\beta \geq \beta_*$. Deux scénarios sont alors possibles :

- si la phase plate $\rho_a(x) = r_a$ est l'unique minimum de $\mathcal{F}[\rho_a]$ pour $\beta < \beta_*$, alors le modèle présente une transition de phase continue (du second ordre) en $\beta_c = \beta_*$;
- si un autre minimum de $\mathcal{F}[\rho_a]$, $\rho_a^{(\min)}(x)$, apparaît pour $0 < \beta < \beta_*$, alors une transition de phase discontinue (du premier ordre) se produit lorsque l'énergie libre de ce nouveau minimum devient inférieure à celle de la phase plate, pour un $\beta_c < \beta_*$.

Comme nous le verrons par la suite, l'étude du modèle ABC sur le cercle en dehors de $N_A = N_B = N_C$ suggère que la transition est bien du deuxième ordre lorsque les densités sont égales, mais qu'elle peut devenir du premier ordre en présence de densités différentes.

Dans le cas du modèle ABC sur un segment, pour lequel la loi d'équilibre (13.1) reste valable lorsque N_A , N_B et N_C diffèrent, il est possible d'établir le diagramme de phase du modèle [3]. Des extensions grand-canoniques du modèle ont été étudiées : celles-ci permettent aux sites de rester vides et autorisent les particules à rejoindre ou à quitter le système selon des processus régis par des potentiels chimiques. Deux de ces modèles ont fait l'objet de travaux, l'un conservant l'égalité des trois densités [70, 71], l'autre non [4].

13.2 Équations hydrodynamiques

Dans [23], Clincy, Derrida et Evans ont également pu étudier le modèle ABC sur le cercle lorsque les densités r_A , r_B et r_C diffèrent. Cette étude, qui relève de la physique statistique hors d'équilibre, s'appuie sur les profils de densité macroscopiques définis par (13.2). Lorsque l'asymétrie q des taux de transition (12.1) vaut 1, la dynamique microscopique donne à ces profils une dynamique diffusive : comme nous considérons des situations où cette asymétrie est faible (12.2), il semble raisonnable de supposer que ce "scaling diffusif" demeure pour $\beta > 0$. Nous introduisons donc des profils macroscopiques variant diffusivement, par

$$\langle A_k(t) \rangle \simeq \rho_A(k/L, t/L^2) \equiv \rho_A(x, \tau)$$

où, outre la variable d'espace $x \in [0, 1]$, nous avons introduit un "temps diffusif" $\tau = t/L^2$.

Les taux de transition (12.1) impliquent que les variables d'évolution $\langle A_k(t) \rangle$ satisfont des équations de la forme

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A_k(t) \rangle}{dt} = & q \langle A_{k-1} B_k \rangle + q \langle C_k A_{k+1} \rangle + \langle B_k A_{k+1} \rangle + \langle A_{k-1} C_k \rangle \\ & - q \langle A_k B_{k+1} \rangle - q \langle C_{k-1} A_k \rangle - \langle B_{k-1} A_k \rangle - \langle A_k C_{k+1} \rangle. \end{aligned} \quad (13.4)$$

En supposant que les fonctions à deux points $\langle A_k B_{k+1} \rangle$ peuvent s'approximer par

$$\langle A_k B_{k+1} \rangle \simeq \langle A_k \rangle \langle B_{k+1} \rangle,$$

(13.4) conduit à des équations d'évolution fermées sur les profils $\rho_a(x, \tau)$:

$$\partial_\tau \rho_a = \partial_x^2 \rho_a + \beta \partial_x \rho_a (\rho_b - \rho_c). \quad (13.5)$$

Celles-ci peuvent se reformuler comme une loi de Fick biaisée sur le courant $j_a(x, \tau)$ de l'espèce a :

$$\begin{cases} \partial_\tau \rho_a = -\partial_x j_a \\ j_a = -\partial_x \rho_a + \beta \rho_a (\rho_c - \rho_b); \end{cases} \quad (13.6)$$

sous cette forme, elles prennent une forme voisine des équations de Fick bruitées de la théorie macroscopique des fluctuations (section 2.2) qui permettent de prédire le comportement stochastique d'un système diffusif conservant une seule quantité. Pour parvenir à une équation similaire dans le cas du modèle ABC , il est nécessaire d'ajouter à (13.6) un terme stochastique. Celui-ci doit satisfaire une relation de fluctuation-dissipation, analogue de (2.5) pour les modèles conservant plusieurs quantités : ainsi, l'équivalent de (2.8) pour le modèle ABC prend la forme

$$j_a = -\partial_x \rho_a + \beta \rho_a (\rho_c - \rho_b) + \frac{1}{\sqrt{L}} \eta_a(x, \tau), \quad (13.7)$$

où $\eta_a(x, \tau)$ est un bruit blanc, tel que $\langle \eta_a(x, \tau) \eta_{a'}(x', \tau') \rangle = \sigma_{aa'} \delta(x - x') \delta(\tau - \tau')$, de matrice de covariance

$$\sigma_{aa'} = \begin{cases} 2\rho_a(1 - \rho_a) & \text{si } a = a' \\ -2\rho_a \rho_{a'} & \text{sinon} \end{cases}$$

(remarquons que ces covariances garantissent $\eta_A + \eta_B + \eta_C = 0$).

13.3 Diagramme de phase

À partir de (13.5), Clincy et al. [23] ont étudié le comportement du modèle ABC pour des densités différentes de $r_A = r_B = r_C = 1/3$. Pour $\beta = 0$, (13.5) montre que les densités $\rho_a(x, \tau)$ diffusent : elles convergent donc à temps long vers les profils plats $\rho_a(x) = r_a$. Ces profils sont-ils stables pour $\beta > 0$? En posant

$$\rho_a(x, \tau) = r_a + \sum_{k \neq 0} \rho_a^{(k)}(\tau) e^{ikx} \text{ avec } k = 2\pi n, n \in \mathbb{Z}^*,$$

avec $\rho_a^{(-k)} = \rho_a^{(k)*}$ et $|\rho_a^{(k)}| \ll r_a$, il est possible d'étudier la stabilité linéaire de ces profils plats. Au premier ordre en $\rho_a^{(k)}$, (13.5) se traduit par

$$\dot{\rho}_a^{(k)} = -k^2 \rho_a^{(k)} + ik\beta \left[r_a(\rho_b^{(k)} - \rho_c^{(k)}) + \rho_a^{(k)}(r_b - r_c) \right]$$

soit, en utilisant $\rho_A^{(k)} + \rho_B^{(k)} + \rho_C^{(k)} = 0$,

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} \rho_A^{(k)} \\ \rho_B^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k^2 + ik\beta(1 - 2r_C) & 2ik\beta r_A \\ -2ik\beta r_B & -k^2 + ik\beta(2r_C - 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_A^{(k)} \\ \rho_B^{(k)} \end{pmatrix}. \quad (13.8)$$

Les valeurs propres de la matrice ci-dessus sont de parties réelles négatives (garantissant la stabilité des $\rho_a^{(k)}(\tau)$) tant que β est suffisamment petit : la plus grande d'entre elles s'annule lorsque

$$\beta_k = \frac{k}{\sqrt{\Delta}} \text{ avec } \Delta = 1 - 2 \sum_a r_a^2. \quad (13.9)$$

Ainsi, la phase plate $\rho_a(x, \tau) = r_a$ est localement stable pour $0 \leq \beta \leq \beta_*$, avec

$$\beta_* \equiv \beta_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{\Delta}}; \quad (13.10)$$

cette valeur coïncide avec celle trouvée au moyen de l'énergie libre $\mathcal{F}[\rho_a]$ (13.3) dans le cas des densités égales ($r_A = 1/3$) dans la section précédente.

Au-delà de β_* , l'un des modes 2π -périodiques de $\rho_a(x, \tau)$ devient instable. La limite à temps long de (13.5), décrivant l'état stationnaire du système au-dessus de β_* , est nécessairement modulée : il semble [18] que cette limite soit statique, soit

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \rho_a(x, \tau) = \bar{\rho}_a(x) \neq r_a$$

(remarquons que, le système étant invariant par translation, tous les $\bar{\rho}_a(x + \varphi)$, pour $\varphi \in [0, 1]$, sont des états stationnaires du système). Cohen et Mukamel [24] ont déterminé les expressions analytiques des profils $\bar{\rho}_a(x)$ décrivant cette phase modulée : celles-ci sont très complexes, mais se simplifient dans la limite $\beta \downarrow \beta_*$. Elles prennent alors, au premier ordre en $|\beta - \beta_*|$, la forme [23]

$$\bar{\rho}_a(x) = r_a + R_a e^{2i\pi x} + cc. + \mathcal{O}(\beta - \beta_*) \quad (13.11)$$

où R_A est fixé à une phase près par

$$|R_A| = \Delta \sqrt{\frac{r_a}{2\Lambda} \frac{\beta - \beta_*}{\beta_*}}, \quad (13.12)$$

où R_B et R_C sont reliés à R_A par (14.4), et en posant

$$\Lambda = \sum_a r_a^2 - 2 \sum_a r_a^3. \quad (13.13)$$

Cette analyse perturbative autour de $\rho_a(x, \tau) = r_a$ ne suffit pas à décrire les différentes phases du système : il reste possible qu'une phase stable non plate apparaisse pour $\beta_c < \beta_*$. (13.12) suggère que cette situation se produit nécessairement pour $\Lambda < 0$. La transition du premier ordre correspondante a fait l'objet d'études numériques [24].

La figure 13.1 indique la valeur de la transition selon la valeur de (r_A, r_B, r_C) : la zone $\Lambda \geq 0$ dans laquelle la transition est du second ordre à $\beta_c = \beta_*$ est une région centrale entourant le point $(1/3, 1/3, 1/3)$. Elle est entourée par trois domaines dans lesquels une transition du premier ordre devrait avoir lieu à un $\beta_c < \beta_*$ non connu analytiquement.

La figure 13.2 ([24], figure 1) montre quand à elle le diagramme de phase du modèle dans la "coupe" $r_B = r_C$ du diagramme précédent, en fonction de la "température" $1/\beta$. La transition est du second ordre pour $r_A \leq 1/\sqrt{3}$: en dehors de cette région, la température inverse β_* correspond au "point spinodal", celui à partir duquel phases plate et modulée ne sont pas toutes deux localement stables.

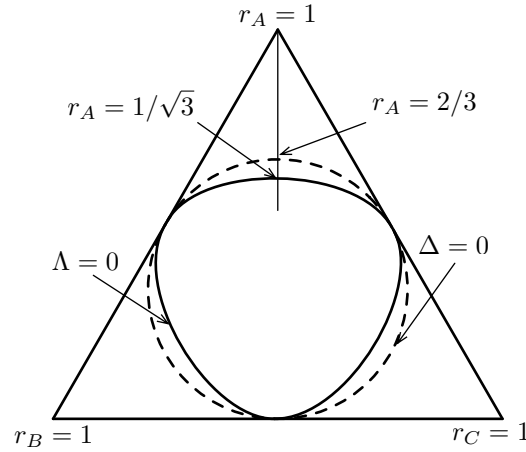


FIGURE 13.1 – Domaines en (r_A, r_B, r_C) dans lesquels la transition de phase du modèle ABC est du second ordre (région centrale) ou du premier ordre (régions périphériques). Ces régions sont séparées par la "ligne tricritique" $\Lambda = 0$ (13.13). La valeur β_c à laquelle se produit la transition n'est connue que lorsque celle-ci est du second ordre, auquel cas elle est égale à la température inverse β_* de déstabilisation de la phase plate (13.10). Lorsque $r_B = r_C$, la transition est du second ordre pour $r_A \leq 1/\sqrt{3}$ et du premier ordre sinon.

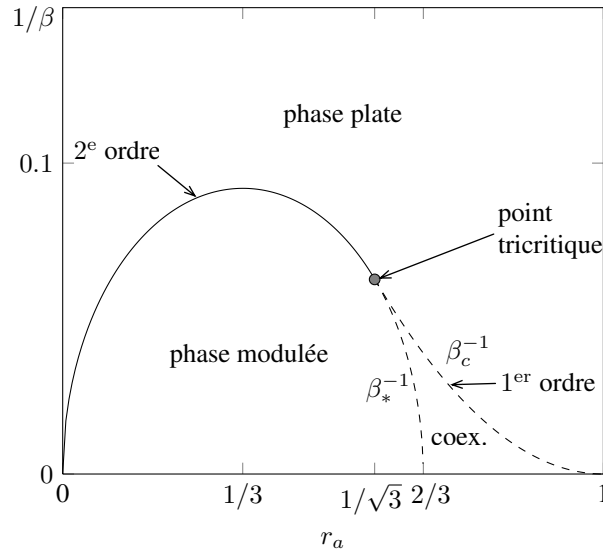


FIGURE 13.2 – Diagramme de phase [24] du modèle ABC en fonction de la température $1/\beta$ pour $r_B = r_C$. La température inverse β_* de déstabilisation de la phase plate (13.10) coïncide avec celle β_c de la transition lorsque celle-ci est du second ordre (soit $\Lambda \geq 0$ ou $r_A < 1/\sqrt{3}$). Dans le cas contraire, la transition, du premier ordre, se produit à $\beta_c < \beta_*$: la phase plate et la phase modulée sont toutes deux stables pour $\beta \in [\beta_c, \beta_*]$.

Régime critique en géométrie périodique

Dans cette section, nous cherchons à déterminer plus précisément le comportement du modèle ABC au voisinage de la transition de phase, lorsque celle-ci est du second ordre. Celle-ci est caractérisée par la prépondérance d'un seul mode spatial de fluctuation des densités par rapport aux autres : à partir des équations hydrodynamiques bruitées (13.7), nous établissons l'équation d'évolution effective suivie par ce mode.

14.1 Hydrodynamique déterministe au point critique

L'analyse de stabilité linéaire de la phase plate (13.8), qui permet de déterminer la valeur β_* à laquelle la transition de phase a lieu lorsque celle-ci est du second ordre, montre que, lorsque β atteint β_* , seul un mode de fluctuation des densités $\rho_a(x, \tau)$ autour de $\rho_a = r_a$ se déstabilise : le vecteur propre de la matrice (13.8) pour $k = 1$ dont la valeur propre s'annule à $\beta = \beta_*$.

Considérons en premier lieu la version déterministe (13.6) de l'équation hydrodynamique du modèle ABC :

$$j_a = -\partial_x \rho_a + \beta \rho_a (\rho_c - \rho_b) + \mathcal{O}(1/\sqrt{L})$$

L'amplitude des bruits blancs diminuant avec L , cette équation permet de décrire à l'ordre dominant en L l'évolution d'un système de grande taille. Nous supposons que, pour $\beta \simeq \beta_*$, les premiers modes de Fourier des densités $\rho_a(x, \tau)$ évoluent plus lentement qu'en dehors de la transition, puisqu'ils ne sont plus que faiblement amortis. Posons ainsi

$$\begin{cases} \rho_a(x, \tau) = r_a + (R_a(\tau)e^{2i\pi x} + \text{cc.}) + \tilde{\rho}_a(x, \tau) \\ j_a(x, \tau) = J_a(\tau) + \left(\frac{i}{2\pi} \dot{R}_a(\tau)e^{2i\pi x} + \text{cc.} \right) - \partial_\tau \int_0^x dy \tilde{\rho}_a(y, \tau) \end{cases} \quad (14.1)$$

où $\tilde{\rho}_a$, qui regroupe tous les modes de Fourier d'ordre supérieur à 2 de $\rho_a(x, \tau)$, reste petit devant R_a , l'ensemble restant une petite fluctuation devant R_a , soit $\tilde{\rho}_a \ll R_a \ll r_a$.

L'hypothèse d'évolution lente se traduit quant à elle par $\partial_\tau R_a \equiv \dot{R}_a \ll R_a$, ainsi que par $\partial_\tau \tilde{\rho}_a \ll \tilde{\rho}_a$; enfin, l'hypothèse $\beta \simeq \beta_*$ nous conduit à poser

$$\beta = \beta_*(1 + \gamma) \text{ avec } \gamma \ll 1.$$

À partir de ces hypothèses, nous pouvons écrire l'ordre dominant de (13.6) sous la forme de deux équations, l'une sur le premier mode de Fourier et l'autre sur les modes restants. Nous obtenons

$$0 = -2i\pi R_a + \beta_* [R_a(r_b - r_c) + r_a(R_b - R_c)] \quad (14.2)$$

$$0 = -\partial_x \tilde{\rho}_a + \beta_* [\tilde{\rho}_a(r_c - r_b) + r_a(\tilde{\rho}_c - \tilde{\rho}_b) + R_a(R_c - R_b)e^{4i\pi x} + \text{cc.}] \quad (14.3)$$

(14.2) relie, à l'ordre dominant, les trois premiers modes de Fourier R_A , R_B et R_C : elle correspond à sélectionner le vecteur propre de (13.8) dont la valeur propre s'annule à $\beta = \beta_*$. Nous choisissons de la satisfaire en exprimant, à l'ordre dominant, R_B et R_C en fonction de R_A : ce qui donne, en résolvant (14.2),

$$\begin{cases} R_B(\tau) = \frac{2r_C - 1 - i\sqrt{\Delta}}{2r_A} R_A(\tau) + x_B(\tau) \\ R_C(\tau) = \frac{2r_B - 1 + i\sqrt{\Delta}}{2r_A} R_A(\tau) + x_C(\tau) \end{cases} \quad (14.4)$$

avec $x_B, x_C \ll R_A$. (14.3) indique que $\tilde{\rho}_a(x, \tau)$ est dominée par son deuxième mode de Fourier, soit

$$\tilde{\rho}_a(x, \tau) \simeq \varphi_a(\tau)e^{4i\pi x} + \text{cc.} \quad (14.5)$$

Ainsi, (14.3) peut se réécrire comme

$$0 = -4i\pi\varphi_a + \beta_* [\varphi_a(r_c - r_b) + r_a(\varphi_c - \varphi_b) + R_a(R_c - R_b)] ,$$

dont la solution prend la forme

$$\varphi_a(\tau) = \frac{1 - 2r_a}{\Delta} [R_a(\tau)]^2. \quad (14.6)$$

(14.4) et (14.6) suffisent pour écrire complètement l'ordre suivant du premier mode de Fourier de (13.6). Celui-ci se met sous la forme

$$\frac{i}{2\pi} \dot{R}_a = 2i\pi\gamma R_a + \beta_* \left[(r_c - r_b - i\sqrt{\Delta})x_a + r_a(x_c - x_b) + \varphi_a(R_c^* - R_b^*) + R_a^*(\varphi_c - \varphi_b) \right] \quad (14.7)$$

en posant $x_A \equiv 0$. Il est possible d'extraire $\dot{R}_A(\tau)$ de cette équation sans calculer x_B et x_C : ceux-ci peuvent être éliminés en formant la combinaison linéaire

$$(r_C - r_B + i\sqrt{\Delta}) \times (\text{éq. sur } \dot{R}_A) - r_A \times (\text{éq. sur } \dot{R}_B) + r_A \times (\text{éq. sur } \dot{R}_C) \quad (14.8)$$

qui permet d'obtenir

$$\dot{R}_A = 4\pi^2 \left(\gamma - \frac{2\Lambda}{\Delta^2} \frac{|R_A|^2}{r_A} \right) R_A \quad (14.9)$$

avec Λ donné par (13.13).

(14.9) décrit l'amortissement effectif subi par le premier mode de Fourier de la densité, R_A lorsque, au voisinage de la transition du second ordre, son amortissement linéaire disparaît : l'amortissement de R_A provient alors de son interaction avec le second mode de Fourier $\varphi_a(\tau)$ (14.6), à l'origine d'un amortissement cubique en R_A .

On peut remarquer que cet amortissement cubique disparaît lorsque la transition survient sur la ligne tricritique $\Lambda = 0$ (fig. 13.1). Dans ce cas, l'analyse ci-dessus se montre insuffisante et doit être poussée un ordre plus loin (voir section 18).

14.2 Hydrodynamique fluctuante et échelle de temps lente

Dans la section ci-dessus, nous avons déterminé, à partir de l'équation d'évolution déterministe (13.6), une équation d'évolution effective (14.9) sur l'amplitude du premier mode de Fourier $R_A(\tau)$ au voisinage du point critique, $\beta \simeq \beta_*$. Prenons maintenant pour point de départ l'équation d'évolution bruitée (13.7).

Comme ci-dessus, nous séparons le premier mode de Fourier, $R_a(\tau)$, dans les fonctions $\rho_a(x, \tau)$ et $j_a(x, \tau)$ (14.1), et supposons que $\tilde{\rho}_a \ll R_a \ll r_a$, $\dot{R}_a \ll R_a$ et $\partial_\tau \tilde{\rho}_a \ll \tilde{\rho}_a$. L'ajout du bruit à (13.6) pour donner (13.7) ne modifie pas l'ordre dominant de son premier mode de Fourier, (14.2) : l'expression de R_B et R_C en fonction de R_A (14.4) n'est donc pas modifiée. En revanche, le bruit intervient dans l'ordre suivant du premier mode de Fourier, (14.7), qui devient

$$\frac{i}{2\pi} \dot{R}_a = 2i\pi\gamma R_a + \beta_* \left[(r_c - r_b - i\sqrt{\Delta})x_a + r_a(x_c - x_b) + \varphi_a(R_c^* - R_b^*) + R_a^*(\varphi_c - \varphi_b) \right] + \frac{1}{\sqrt{L}} \nu_a(\tau), \quad (14.10)$$

où ν_a est la composante de $\eta_a(x, \tau)$ sur le premier mode de Fourier :

$$\nu_a(\tau) = \int_0^1 dx e^{-2i\pi x} \eta_a(x, \tau).$$

Ainsi, les $\nu_a(\tau)$ sont donc des bruits blancs complexes : $\langle \nu_a(\tau) \nu_{a'}^*(\tau') \rangle = \sigma_{aa'} \delta(\tau - \tau')$ et $\langle \nu_a(\tau) \nu_{a'}(\tau') \rangle = \langle \nu_a^*(\tau) \nu_{a'}^*(\tau') \rangle = 0$.

Les deuxièmes modes de Fourier $\varphi_a(\tau)$ (14.5) satisfont quant à eux

$$\frac{i}{4\pi} \dot{\varphi}_a = -4i\pi\varphi_a + \beta_* [\varphi_a(r_c - r_b) + r_a(\varphi_c - \varphi_b) + R_a(R_c - R_b)] + \frac{\nu_a^{(2)}(\tau)}{\sqrt{L}},$$

où $\nu_a^{(2)}(\tau)$ est la composante de $\eta_a(x, \tau)$ sur le deuxième mode de Fourier. Ainsi, les φ_a fluctuent autour de leur expression non bruitée (14.6). Toutefois, ces fluctuations sont d'ordre $1/\sqrt{L}$: les φ_a apparaissant sous la forme $\varphi_a R_{a'}$ dans (14.10), leurs fluctuations provoquent des fluctuations d'ordre $|R_a|/\sqrt{L}$ dans cette équation. Ces fluctuations sont donc dominées par celles, en $1/\sqrt{L}$, dues aux $\nu_a(\tau)$: par conséquent, dans (14.10), nous pouvons remplacer à l'ordre dominant les φ_a par leurs expressions non bruitées (14.6).

Prenant la combinaison linéaire (14.8) pour éliminer les x_a , nous obtenons

$$\dot{R}_A = 4\pi^2 \left(\gamma - \frac{2\Lambda}{\Delta^2} \frac{|R_A|^2}{r_A} \right) R_A + \frac{1}{\sqrt{L}} \mu_A(\tau) \quad (14.11)$$

où $\mu_A(\tau)$, obtenu par combinaison linéaire des ν_a , vérifie

$$\langle \mu_A(\tau) \mu_A(\tau') \rangle = \frac{24\pi^2 r_A^2 r_B r_C}{\Delta} \delta(\tau - \tau'). \quad (14.12)$$

À partir de (14.11), nous pouvons réaliser un changement d'échelles pour obtenir la dépendance en L de l'amplitude et de l'échelle de temps typique de R_A dans un système de taille L : posant

$$R_A(\tau) = \left[\frac{3\Delta r_A^3 r_B r_C}{\Lambda L} \right]^{1/4} \times f(\bar{\tau}) \quad (14.13)$$

avec

$$\bar{\tau} = 8\pi^2 \frac{\sqrt{3\Lambda r_A r_B r_C}}{\Delta^{3/2}} \frac{\tau}{\sqrt{L}}, \quad (14.14)$$

nous arrivons à

$$\frac{df}{d\bar{\tau}} = [\bar{\gamma} - |f(\bar{\tau})|^2] f(\bar{\tau}) + \mu(\bar{\tau}) \quad (14.15)$$

avec

$$\bar{\gamma} = \frac{\Delta^{3/2}}{2\sqrt{3\Lambda r_A r_B r_C}} \sqrt{L} \frac{\beta - \beta_*}{\beta_*} \quad (14.16)$$

et $\mu(\bar{\tau})$ un bruit blanc complexe tel que $\langle \mu(\bar{\tau}) \mu^*(\bar{\tau}') \rangle = \delta(\bar{\tau} - \bar{\tau}')$.

Ainsi, pour un système de taille L , il existe un régime critique, pour $|\beta - \beta_*| \sim 1/\sqrt{L}$, dans lequel les profils de densités $\rho_a(x, \tau)$ sont dominés par des premiers modes de Fourier reliés par (14.4). Ces modes de Fourier fluctuent avec un amplitude d'ordre $1/L^{1/4}$, sur une échelle de temps $\bar{\tau}$ d'ordre $\tau/\sqrt{L} = t/L^{5/2}$, plus lente que l'échelle de temps diffusive.

Ces fluctuations suivent, après un changement d'échelle (14.13), une équation de Langevin amortie (14.15) dans le potentiel quartique sur \mathbb{C}

$$V(f) = \frac{|f|^4}{4} - \bar{\gamma} \frac{|f|^2}{2}.$$

Par la suite, il nous sera utile de réexprimer cette équation de Langevin sous la forme d'une équation de Fokker Planck sur la distribution de $f(\bar{\tau})$,

$$P(f_x, f_y, \bar{\tau}) \equiv \text{Pro}[f(\bar{\tau}) \simeq f_x + i f_y]. \quad (14.17)$$

En posant $\vec{r} = (f_x, f_y)$, cette équation s'exprime à l'aide d'opérateurs vectoriels :

$$\partial_{\bar{\tau}} P = \text{div} [(r^2 - \bar{\gamma}) P \vec{r}] + \frac{1}{4} \nabla^2 P. \quad (14.18)$$

Sous cette forme, il est facile de voir que la distribution stationnaire de $f(\bar{\tau})$, $P_{\text{st.}}(f_x, f_y)$, vérifie

$$P_{\text{st.}}(f_x, f_y) \propto e^{2\bar{\gamma}r^2 - r^4}. \quad (14.19)$$

Corrélations anormales au point critique

Dans cette section, nous nous intéressons aux fonctions de corrélation, spatiales et temporelles, du modèle ABC au voisinage de sa transition du second ordre. Les états stationnaires hors d'équilibre sont souvent caractérisés par la présence de corrélations à longue portée; d'autre part, les transitions de phase sont souvent associées à la divergence de longueurs de corrélation.

15.1 Anomalie des corrélations spatiales

Dans cette section, nous cherchons à étudier, dans le régime critique, les fonctions de corrélation spatiales du modèle ABC : par exemple

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_l(t)] - \sum_a r_a^2$$

pour $1 \leq k, l \leq L$ deux sites arbitraires du réseau microscopique. La nature diffusive du système nous permet d'exprimer cette fonction en termes des profils macroscopiques $\rho_a(x, \tau)$:

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_l(t)] - \sum_a r_a^2 \simeq \sum_a \langle \rho_a(k/L, \tau) \rho_a(l/L, \tau) \rangle_c,$$

où $\tau : t/L^2$ est le temps diffusif. Dans la phase plate $\beta < \beta_*$, ces corrélations peuvent être calculées analytiquement [19], et décroissent en $1/L$; dans la phase $\beta > \beta_*$, la modulation des profils stationnaires $\bar{\rho}_a(x)$ induit des corrélations spatiales d'ordre 1. Nous nous proposons de montrer ici que ces corrélations décroissent en $1/\sqrt{L}$ dans le régime critique.

Nous avons montré dans la section 14.1 que le régime critique $|\beta - \beta_*| \sim 1/\sqrt{L}$ est caractérisé par la prédominance du premier mode de Fourier des densités $R_A(\tau)$, dont les fluctuations sont en $L^{-1/4}$ dans l'état stationnaire. Ainsi, dans le régime critique, seul ce mode intervient à l'ordre dominant L :

$$\langle \rho_a(x, \tau) \rho_a(y, \tau) \rangle_c \simeq \langle (r_a + R_a(\tau)e^{2i\pi x} + \text{cc.}) (r_a + R_a(\tau)e^{2i\pi y} + \text{cc.}) \rangle_c.$$

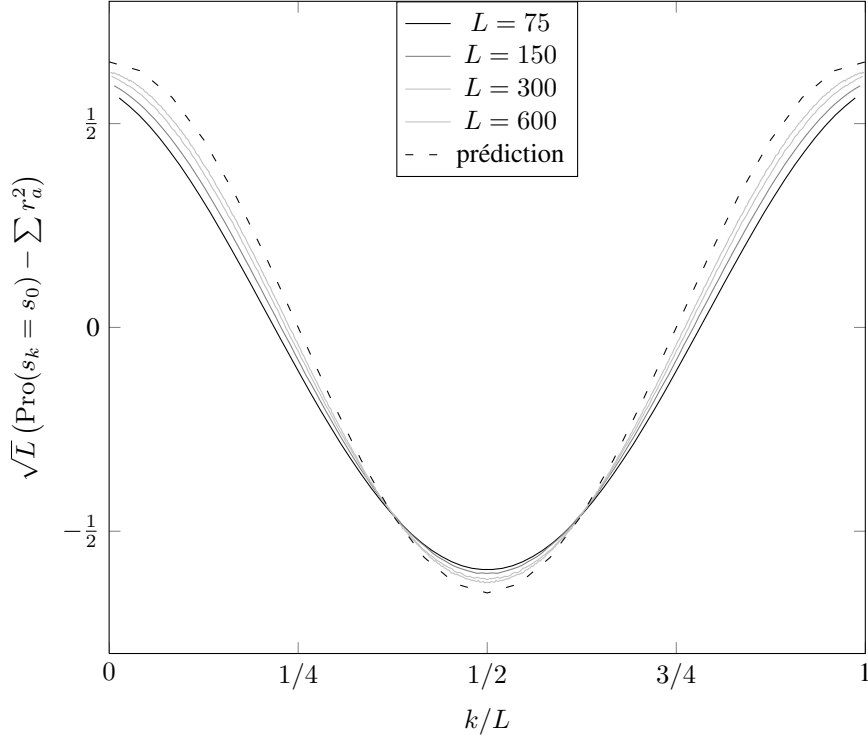


FIGURE 15.1 – Corrélations spatiales dans l'état stationnaire du modèle ABC pour $r_A = r_B = r_C = 1/3$ et $\beta = \beta_*$. Nous comparons la prédiction issue de notre analyse du point critique (15.3) aux résultats de simulations numériques sur des systèmes de $75 \leq L \leq 600$ particules.

L'expression de $R_a(\tau)$ en fonction de $f(\bar{\tau})$ (14.13) et la distribution stationnaire de ce dernier (14.19) montrent que $\langle R_a^2 \rangle = \langle R_a^{*2} \rangle = 0$ et que

$$\langle |R_a|^2 \rangle = r_a \sqrt{\frac{3\Delta r_a r_b r_c}{\Lambda L}} \langle |f|^2 \rangle. \quad (15.1)$$

À partir de l'état stationnaire (14.19) de l'équation de Fokker-Planck (14.18) satisfaite par la distribution de $f(\bar{\tau})$, nous pouvons calculer

$$\langle |f|^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty r^3 e^{2\bar{\gamma}r^2 - r^4} dr}{\int_0^\infty r e^{2\bar{\gamma}r^2 - r^4} dr} = \bar{\gamma} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\bar{\gamma}^2}}{\int_{-\infty}^{\bar{\gamma}} e^{-z^2} dz} \equiv C_1(\bar{\gamma}). \quad (15.2)$$

Sommant sur l'espèce $a \in \{A, B, C\}$, (15.1) et (15.2) conduisent donc à

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_l(t)] - \sum_a r_a^2 \simeq 2\sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda L}} C_1(\bar{\gamma}) \cos 2\pi \frac{k-l}{L}. \quad (15.3)$$

Notre théorie effective du point critique 14.2 prédit donc que, au voisinage de β_* , les corrélations spatiales de l'état stationnaire du modèle ABC sont des arches de sinus, d'amplitude décroissant en $1/\sqrt{L}$. Dans la figure 15.1, nous comparons cette prédiction (15.3) à des mesures numériques réalisées sur des systèmes de taille $75 \leq L \leq 600$, pour $r_A = r_B = r_C = 1/3$ et $\beta = \beta_*$.

Comparaison avec des résultats hors du point critique

L'expression (15.3) des fonctions de corrélation dans le régime critique peut, a priori, se "recoller" à celles obtenues dans la phase plate ($\beta < \beta_*$) et dans la phase modulée ($\beta > \beta_*$) en prenant, respectivement, les limites $\bar{\gamma} \rightarrow -\infty$ et $\bar{\gamma} \rightarrow \infty$. Or, ces corrélations sont connues analytiquement, tant pour $\beta < \beta_*$ [19] que pour $\beta \gtrsim \beta_*$ [23] : ces limites constituent donc un moyen supplémentaire de vérifier (15.3).

Pour $\beta < \beta_*$, l'expression exacte des fonctions de corrélation ([19], éq. (23)) diverge lorsque $\beta \rightarrow \beta_*^-$, prenant la forme approchée

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_l(t)] - \sum_a r_a^2 \underset{\beta \uparrow \beta_*}{\simeq} \frac{6r_A r_B r_C}{\Delta L} \frac{\beta_*}{\beta_* - \beta} \cos 2\pi \frac{k-l}{L};$$

cette expression est compatible avec (15.3), sachant que $C_1(\bar{\gamma}) \simeq -1/2\bar{\gamma}$ lorsque $\bar{\gamma} \rightarrow -\infty$.

Pour $\beta > \beta_*$, $\beta \simeq \beta_*$, la forme des profils modulés $\bar{\rho}_a(x)$ de l'état stationnaire est connue (voir (13.11) ou [23], éq. (39)) : elle donne lieu à des corrélations de la forme

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_l(t)] - \sum_a r_a^2 \underset{\beta \downarrow \beta_*}{\simeq} \frac{\Delta^2}{\Lambda} \frac{\beta - \beta_*}{\beta_*} \cos 2\pi \frac{k-l}{L}.$$

Sachant que $C_1(\bar{\gamma}) \simeq \bar{\gamma}$ lorsque $\bar{\gamma} \rightarrow \infty$, cette expression est également compatible avec (15.3).

15.2 Corrélations temporelles

Nous nous intéressons dans cette section à l'effet de la transition de second ordre sur les corrélations temporelles dans le modèle ABC . De même que pour les corrélations spatiales (voir ci-dessus), notre analyse indique que ces corrélations sont dominées, au voisinage du point critique, par le premier mode de Fourier des densités, $R_A(\tau)$, pour lequel nous avons calculé dans la section 14 l'équation d'évolution effective (14.11) :

$$\frac{dR_A}{d\tau} = 4\pi^2 \left[\gamma - \frac{2\Lambda}{\Delta^2} \frac{|R_A|^2}{r_A} \right] R_A + \frac{\mu_A(\tau)}{\sqrt{L}}. \quad (15.4)$$

L'amplitude du bruit blanc $\mu_A(\tau)$ décroissant avec L , nous pouvons envisager d'observer deux régimes. Dans le premier, la contribution du bruit à (15.4) reste négligeable, et conduit à l'observation d'une décroissance en loi de puissance de R_A sur l'échelle de temps $\tau = t/L^2$. Le second régime se manifeste sur l'échelle de temps lente $\bar{\tau} \sim t/L^{5/2}$ (14.14), et correspond à une décroissance exponentielle des corrélations : son coefficient peut être calculé en étudiant l'équation de Fokker-Planck (14.18) caractérisant l'évolution bruitée de R_A .

15.2.1 Décroissance en loi de puissance

Nous cherchons tout d'abord à cerner une situation dans laquelle le terme stochastique de l'équation d'évolution de R_A peut être négligé. Pour ceci, il est nécessaire que R_A

soit grand devant $L^{-1/4}$, l'ordre de grandeur de ses fluctuations dans l'état stationnaire (14.13).

Cette condition est satisfaite si nous considérons le cas d'un système placé initialement dans une configuration éloignée de l'état stationnaire : nous avons étudié ici le cas d'une configuration initiale totalement séparée, de la forme $AA...AAB..BBCC..CC$. Du point de vue macroscopique, cette configuration est caractérisée par des profils de densité initiaux $\rho_a(x, 0)$ dont tous les modes de Fourier $\rho_a^{(k)}(0)$ sont d'ordre 1.

Pour un système dans la phase plate ($\beta < \beta_*$), les équations d'évolution (13.5) indiquent que tous les modes de Fourier relaxent vers 0 en un temps diffusif fini, soit en un temps microscopique d'ordre L^2 . Près du point critique, le premier mode de Fourier R_A décroît plus lentement que les autres modes : après un temps microscopique d'ordre L^2 , tous les modes de Fourier deviennent négligeables devant R_A , qui évolue quant à lui selon

$$\frac{dR_A}{d\tau} = 4\pi^2 \left[\gamma - \frac{2\Lambda}{\Delta^2} \frac{|R_A|^2}{r_A} \right] R_A$$

tant que son amplitude reste grande devant $L^{-1/4}$. Pour un système au point critique ($\beta = \beta_*$, soit $\gamma = 0$), cette évolution prend la forme d'une loi de puissance :

$$R_A(\tau) = \frac{R_A(0)}{\sqrt{1 + \frac{16\pi^2\Lambda}{r_A\Delta^2} |R_A(0)|^2 \tau}} \underset{\tau \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{R_A(0)}{|R_A(0)|} \frac{\Delta}{4\pi} \sqrt{\frac{r_A}{\Lambda\tau}}. \quad (15.5)$$

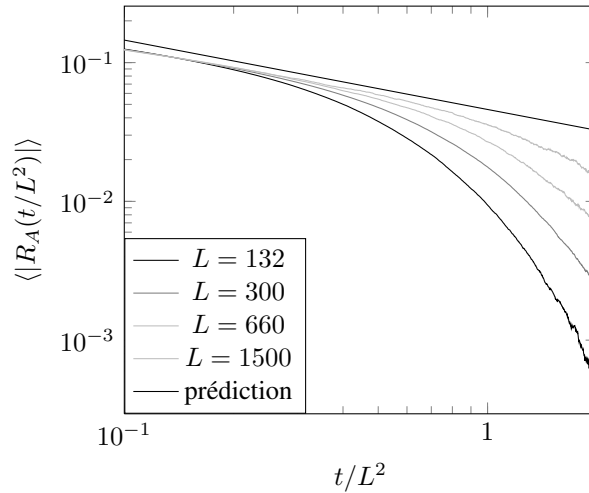


FIGURE 15.2 – Évolution du module du premier mode de Fourier de la densité de particules A , $R_A(\tau)$ (15.6), pour des systèmes de 132 à 1500 particules évoluant depuis une condition initiale totalement séparée, pour $\beta = \beta_*$ et $r_A = r_B = r_C = 1/3$. La convergence vers la loi de puissance prédite par l'analyse du régime critique (15.5) est "coupée" à un temps qui semble croître plus vite que l'échelle de temps diffusive L^2 .

Notre théorie effective au point critique prédit donc que, pour un système relaxant depuis une condition initiale loin de l'état stationnaire, le premier mode de Fourier R_A décroisse en loi de puissance lorsque $L^2 \ll t \ll L^{5/2}$. La contrainte $t \gg L^2$ est

nécessaire pour que R_A devienne dominant devant les autres modes ; $t \ll L^{5/2}$ est imposé par la nécessité que $|R_A|$ reste grand devant ses fluctuations d'ordre $L^{-1/4}$ dans l'état stationnaire.

Nous avons mesuré numériquement le module du premier mode de Fourier, R_A , dans des systèmes de 132 à 1500 particules, à partir de sa définition microscopique :

$$R_A(t/L^2) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L A_k(t) e^{2i\pi k/L} . \quad (15.6)$$

Dans la figure 15.2, nous comparons ces mesures à la loi de puissance prédite ci-dessus (15.5), pour $r_A = r_B = r_C = 1/3$ et $\beta = \beta_*$. Bien que les conditions de validité $L^2 \ll t \ll L^{5/2}$ de la loi de puissance semblent a priori difficiles à satisfaire, il apparaît que la relaxation des autres modes devant R_A se produit assez rapidement, sur des temps $t \sim 10^{-1} L^2$: de plus, l'écart à la loi de puissance se produit bien à des temps $t/L^2 \simeq \tau_{\text{decay}}(L)$ croissants avec la taille L du système.

15.2.2 Décroissance à l'échelle de temps lente

Nous nous intéressons ici aux situations dans lesquelles le bruit $\mu_A(\tau)$ de l'équation d'évolution du premier mode $R_A(\tau)$ devient non négligeable. Comme nous l'avons vu ci-dessus, ceci se produit, dans un système relaxant depuis une condition initiale non stationnaire, lorsque l'amplitude de R_A devient d'ordre $L^{-1/4}$; a fortiori, pour un système initialement dans l'état stationnaire, l'ensemble de l'évolution a lieu dans le régime bruité.

Dans la section 14.2, nous avons montré par un changement d'échelle de (14.11) que R_A varie, dans ce régime bruité, sur une échelle de temps $\bar{\tau}$ de l'ordre de $L^{5/2}$. Nous avons mis l'équation de Langevin suivie par R_A sous la forme d'une équation de Fokker-Planck suivie par la distribution (14.17) de son amplitude rescalée $f(\bar{\tau})$ (14.14) :

$$\partial_{\bar{\tau}} P = \text{div} [(r^2 - \bar{\gamma}) P \bar{r}] + \frac{1}{4} \nabla^2 P \equiv H_{\bar{\gamma}} P, \text{ soit } P_{\bar{\tau}} = e^{\bar{\tau} H_{\bar{\gamma}}} P_0 . \quad (15.7)$$

Soit $s_k(t) \in \{A, B, C\}$ le type, au temps microscopique t , du site $1 \leq k \leq L$. Nous mesurons des corrélations de la forme

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_k(0)] - \sum_a r_a^2 \simeq \left\langle \sum_a \rho_a(x, 0) \rho_a(x, \tau) \right\rangle_c$$

Au point critique, nous faisons l'hypothèse que ces corrélations sont dominées par le premier mode $R_A(\tau)$, dont l'amplitude (en $L^{-1/4}$) est supérieure à celles des autres modes (en $L^{-1/2}$), soit

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_k(0)] - \sum_a r_a^2 \simeq \sum_a \langle R_a(0) R_a^*(\tau) + \text{cc.} \rangle \propto \frac{1}{\sqrt{L}} \langle f(0) f^*(\bar{\tau}) + \text{cc.} \rangle . \quad (15.8)$$

$H_{\bar{\gamma}}$ jouant le rôle d'un opérateur d'évolution pour la distribution $P(f_x, f_y, \bar{\tau})$ de $f(\bar{\tau})$, nous nous attendons à ce que les corrélations de f décroissent exponentiellement, sur un temps caractéristique dépendant du spectre de $H_{\bar{\gamma}}$: plus précisément,

$$\langle f(0) f^*(\bar{\tau}) + \text{cc.} \rangle \underset{\bar{\tau} \rightarrow \infty}{\propto} \exp[\lambda_{\bar{\gamma}} \bar{\tau}] = \exp \left[8\pi^2 \frac{\sqrt{3\Lambda r_A r_B r_C}}{\Delta^{3/2}} \lambda_{\bar{\gamma}} \frac{t}{L^{5/2}} \right] \quad (15.9)$$

avec $\lambda_{\bar{\gamma}}$ la seconde plus grande valeur propre de $H_{\bar{\gamma}}$ (la plus grande étant 0, avec pour vecteur propre la distribution stationnaire $P_{\text{st.}}(f_x, f_y)$).

$H_{\bar{\gamma}}$ correspondant à une évolution dans un potentiel quartique, nous ne disposons pas d'une expression analytique de $\lambda_{\bar{\gamma}}$. Toutefois, nous pouvons approcher cette valeur en approximant numériquement $H_{\bar{\gamma}}$: la méthode que nous avons utilisée consiste à calculer le spectre de la restriction de $H_{\bar{\gamma}}$ à un sous-espace de dimension finie, puis d'étudier la convergence des valeurs propres obtenues lorsque cette dimension grandit.

Notre choix s'est porté un sous-espace de la forme

$$P_Q(f_x, f_y) = Q(f_x, f_y) \times e^{2\bar{\gamma}r^2 - r^4},$$

avec $Q(f_x, f_y)$ un polynôme de degré N en (f_x, f_y) , de telle sorte que la distribution stationnaire $P_{\text{st.}}(f_x, f_y)$ corresponde à $P_1(f_x, f_y)$. Pour calculer le spectre de $H_{\bar{\gamma}}$, nous devons introduire un produit scalaire $\langle \cdot | \cdot \rangle$ par rapport auquel celui-ci soit hermitien : nous avons choisi

$$\langle P_Q | P_R \rangle = \iint d^2f e^{r^4 - 2\bar{\gamma}r^2} P_Q(f_x, f_y) P_R(f_x, f_y) = \iint d^2f e^{2\bar{\gamma}r^2 - r^4} Q(f_x, f_y) R(f_x, f_y),$$

pour lequel nous obtenons les éléments de matrice de $H_{\bar{\gamma}}$ suivants :

$$\langle P_Q | H_{\bar{\gamma}} | P_R \rangle = -\frac{1}{4} \iint d^2f e^{2\bar{\gamma}r^2 - r^4} (\nabla Q) \cdot (\nabla R). \quad (15.10)$$

Pour $\beta = \beta_*$, nous avons construit par pivot de Gauss une base orthonormée de l'espace $\{P_Q(f_x, f_y) \text{ tq. } \deg Q \leq N\}$, puis calculé les éléments de matrice (15.10) dans cette base, et enfin déterminé numériquement le spectre de H_0 . Nous avons obtenu pour la deuxième valeur propre $\lambda_0(N)$ les valeurs suivantes :

N	$\lambda_0(N)$
1	-0.886227
2	-0.838218
3	-0.836041
4	-0.834289
5	-0.83393
6	-0.833918
7	-0.833918

$\lambda_0(N)$ semble donc converger rapidement vers une valeur proche de -0.83 . Dans la figure 15.3, nous avons comparé, pour cette valeur de λ_0 , le coefficient de la décroissance exponentielle à l'échelle $t \sim L^{5/2}$ prédit par (15.8) à des mesures des corrélations $\text{Pro}[s_k(t) = s_k(0)]$ de systèmes de 60 à 960 particules dans l'état stationnaire, pour $\beta = \beta_*$ et $r_A = r_B = r_c = 1/3$.

Remarquons que, bien que l'expression (15.9) de cette décroissance en fonction de la valeur propre $\lambda_{\bar{\gamma}}$ ne soit en principe valide que pour $t/L^{5/2} \gg 1$ (afin que l'effet des autres valeurs propres s'atténue), nous obtenons un bon accord dès que $t/L^{5/2} \sim 10^{-1}$.

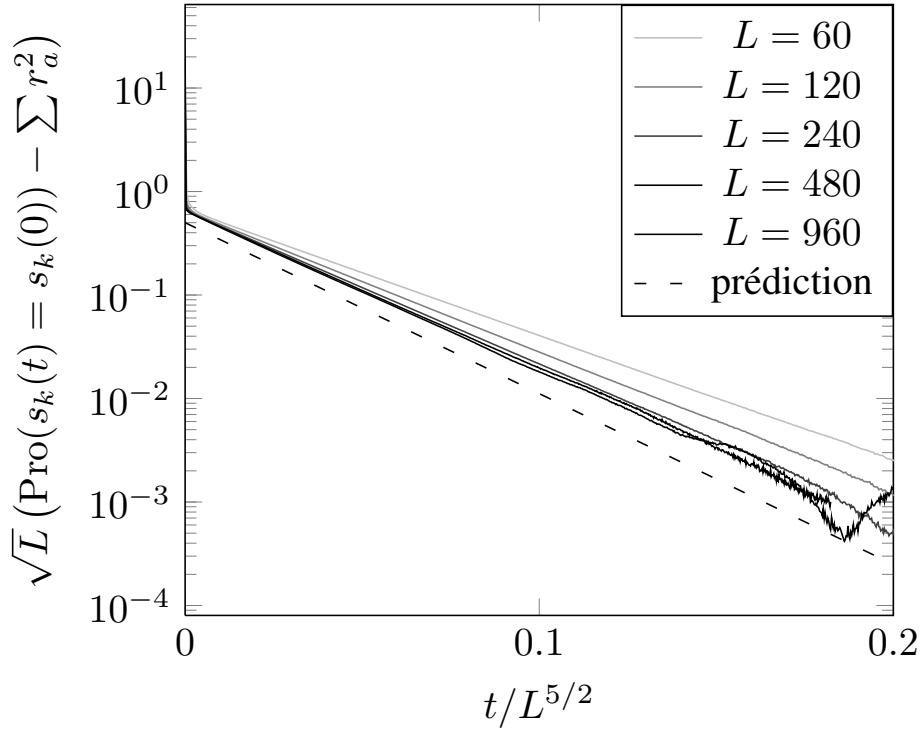


FIGURE 15.3 – Décroissance des corrélations temporelles des densités dans l'état stationnaire du modèle ABC , pour $\beta = \beta_*$ et $r_A = r_B = r_C = 1/3$, dans des systèmes de taille $60 \leq L \leq 960$, en fonction de l'échelle de temps lente $t/L^{5/2}$ du régime critique (14.14). Sur presque toute la gamme de temps étudiée, la décroissance semble exponentielle, avec un temps caractéristique compatible avec celui calculé (15.8) à partir de notre analyse du régime critique (15.7).

Fluctuations de courant au point critique

Dans ce chapitre, nous étudions l'effet de la transition du second ordre du modèle ABC sur les fluctuations du courant $Q_A(t)$ de particules A à travers le système dans l'état stationnaire.

Notre point de départ est, de nouveau, l'analyse que nous avons réalisée dans le chapitre 14, selon laquelle le régime critique est dominé par des fluctuations de grande amplitude (en $1/L^{1/4}$ pour un système de taille L) du premier mode de Fourier des densités de particules, et ce sur une échelle de temps plus lente ($L^{5/2}$) que l'échelle de temps diffusive L^2 .

À cause de ces fluctuations, les cumulants de $Q(t)$ décroissent anormalement dans le régime critique. Dans le cas général, nous aboutissons au comportement suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\langle Q_A(t) \rangle}{t} &\simeq \frac{A_1}{L} + \frac{B_1}{L^{3/2}} \\ \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} &\simeq \frac{B_1}{L^{5/2-n}} \end{aligned}$$

à l'ordre dominant en L . Ainsi les cumulants de $Q_A(t)$ suivent une loi de Fourier anormale, les cumulants d'ordre supérieur croissant de plus en plus rapidement avec L : ce comportement n'est pas sans rappeler celui que nous avons observé numériquement, dans la partie 2, pour des systèmes mécaniques en géométrie périodique (section 10.3).

16.1 Forme d'échelle des cumulants du courant

À partir de l'équation de Fick bruitée (13.7), nous pouvons calculer la moyenne spatiale $J_A(\tau)$ du courant $j_A(x, \tau)$ de particules A . Nous obtenons ainsi

$$J_A(\tau) = \beta \int_0^1 \rho_A(x, \tau) [\rho_C(x, \tau) - \rho_B(x, \tau)] + \frac{1}{\sqrt{L}} \nu_A^{(0)}(\tau), \quad (16.1)$$

où $\nu_A^{(0)}(\tau)$ est un bruit blanc obtenu en intégrant en x le bruit $\eta_A(x, \tau)$ de (13.7), soit

$$\langle \nu_A^{(0)}(\tau) \nu_A^{(0)}(\tau') \rangle = \delta(\tau - \tau') \int_0^1 dx \rho_A(x, \tau) [1 - \rho_A(x, \tau)] . \quad (16.2)$$

Soit $Q_A(t)$ le courant intégré de particules A pendant un temps microscopique t . $Q_A(t)$ peut être mesuré de plusieurs manières différentes : en comptant le nombre de particules A qui traversent un lien particulier du système, ou en faisant la moyenne de ces mesures sur tous les liens du réseau. Toutefois, ces mesures ne peuvent différer que d'au plus N_A , le nombre total de particules A dans le système : celui-ci étant borné, les limites

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t}$$

ne dépendent plus de la méthode de mesure de $Q_A(t)$ choisie. Or, si nous choisissons de calculer $Q_A(t)$ à partir du courant moyenné sur tous les sites du réseau, alors celui-ci peut-être relié au courant hydrodynamique moyen $J_A(\tau)$ par

$$Q_A(t) = \frac{1}{L} \int_0^t J_A(t'/L^2) dt' = L \int_0^{t/L^2} J_A(\tau) d\tau . \quad (16.3)$$

Considérons maintenant le cas d'un système placé dans le régime critique $|\beta - \beta_*| \sim 1/\sqrt{L}$. Nous avons montré que, dans ce régime, $\rho_A(x, \tau)$ est dominé par les fluctuations de son premier mode de Fourier $R_A(\tau)$, d'ordre $1/L^{1/4}$: remplaçant (14.1), (14.4) et (14.13) dans (16.1), nous aboutissons à

$$J_A(\tau) = \beta r_A(r_C - r_B) + 2\beta(r_B - r_C) \sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda L}} |f(\bar{\tau})|^2 + \frac{1}{\sqrt{L}} \nu_A(\tau) , \quad (16.4)$$

dans lequel les fluctuations rescalées du premier mode $f(\bar{\tau})$ varient sur l'échelle de temps lente $\bar{\tau} \propto t/L^{5/2}$ (14.14). $Q_A(t)$ s'obtenant en intégrant temporellement $J_A(\tau)$ (16.3), les fluctuations lentes de $f(\bar{\tau})$ donnent lieu à des fluctuations de grande amplitude de $Q_A(t)$.

Nous obtenons ainsi à partir de (16.3)

$$\frac{\langle Q_A(t) \rangle}{t} \simeq \frac{1}{L} \beta r_A(r_C - r_B) + \frac{2}{L^{3/2}} \beta(r_B - r_C) \sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda}} C_1(\bar{\gamma}) \quad (16.5)$$

$$\frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} \simeq \frac{1}{L^{5/2-n}} \frac{8\pi^2 \sqrt{3\Lambda r_A r_B r_C}}{\Delta^{3/2}} \left[\frac{\Delta^{3/2}(r_B - r_C)}{2\pi\Lambda} \right]^n C_n(\bar{\gamma}) \quad (16.6)$$

avec $\bar{\gamma}$ l'écart rescalé au point critique (14.16), et en posant

$$C_n(\bar{\gamma}) = \lim_{\bar{\tau} \rightarrow \infty} \frac{1}{\bar{\tau}} \int_0^{\bar{\tau}} d\bar{\tau}_1 \dots d\bar{\tau}_n \langle |f(\bar{\tau}_1) \dots f(\bar{\tau}_n)|^2 \rangle_c . \quad (16.7)$$

Le n -ième cumulant de $Q_A(t)$ dépend donc des statistiques de l'amplitude rescalée du premier mode de Fourier $f(\bar{\tau})$ à travers l'intégrale $C_n(\bar{\gamma})$ de la fonction de corrélation à n points de $|f(\bar{\tau})|^2$. $f(\bar{\tau})$ obéissant à une équation de Langevin dans un potentiel quartique (14.15), il nous a été impossible de calculer les $C_n(\bar{\gamma})$ analytiquement, à l'exception de

$C_1(\bar{\gamma}) = \langle |f(\bar{\tau})|^2 \rangle$, que nous avons déjà calculé pour déterminer les corrélations dans l'état stationnaire de $\rho_A(x, \tau)$ (15.2) dans la section 15.1 :

$$C_1(\bar{\gamma}) = \bar{\gamma} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\bar{\gamma}^2}}{\int_{-\infty}^{\bar{\gamma}} e^{-z^2} dz}.$$

Dans le chapitre 17, nous nous proposons de vérifier (16.5) et (16.6). Pour cela, nous calculons tout d'abord, par des méthodes différentes, les expressions des cumulants $\langle Q_A^n(t) \rangle_c / t$ pour des systèmes hors du régime critique, dans la phase plate (section 17.1) et dans la phase modulée (section 17.2) : nous pouvons ainsi vérifier que les expressions obtenues se "raccordent" correctement à (16.5) et (16.6) dans les limites $\bar{\gamma} \rightarrow -\infty$ et $\bar{\gamma} \rightarrow \infty$.

Nous avons ensuite mesuré numériquement, dans la section 17.3, les deux premiers cumulants de $Q_A(t)$ dans des systèmes de 80 à 640 particules, pour $r_A = r_B = 1/4$ et $0 \leq \beta \leq 2\beta_*$. Les résultats obtenus nous permettent de confirmer nos prédictions des écarts de $\langle Q_A(t) \rangle / t$ et de $\langle Q_A^2(t) \rangle_c / t$, (16.5) et (16.6), à leurs termes en $1/L$ (figure 17.2).

16.2 Le cas des densités égales

L'expression (16.3) de $J_A(\tau)$ en fonction de l'amplitude du premier mode de Fourier $f(\bar{\tau})$ perd son sens lorsque les deux densités r_B et r_C prennent la même valeur $(1 - r_A)/2$. Dans ce cas, la distribution de $Q_A(t)$ est paire, soit

$$\langle Q_A^n(t) \rangle_c = 0 \text{ pour } n \text{ impair.} \quad (16.8)$$

En effet, le modèle *ABC* présente une symétrie par renversement du temps : par construction des taux microscopiques (12.1), à toute évolution du modèle *ABC* du temps 0 au temps t correspond une évolution d'un modèle "ACB" (où les particules de types *B* et *C*) sont interverties) du temps t ou temps 0. L'évolution à temps renversé présentant un courant $-Q_A(t)$, nous pouvons écrire

$$\langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle_{\beta, r_A, r_B, r_C} = \langle e^{-\lambda Q_A(t)} \rangle_{\beta, r_A, r_C, r_B}$$

d'où (16.8) lorsque $r_B = r_C$. Ainsi, nous avons dans ce cas, à l'ordre dominant en L ,

$$Q_A(t) = \sqrt{L} \int_0^{t/L^2} \nu_A^{(0)}(\tau) d\tau$$

avec

$$\langle \nu_A^{(0)}(\tau) \nu_A^{(0)}(\tau') \rangle = \delta(\tau - \tau') \left[r_A(1 - r_A) - 2r_A \sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda L}} |f(\bar{\tau})|^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) \right].$$

Les fluctuations sur l'échelle de temps lente de la variance de $\nu_A^{(0)}$, de même que celles de J_A dans le cas $r_B \neq r_C$, entraînent une divergence des cumulants de Q_A : celle-ci prend

la forme

$$\begin{aligned}\frac{\langle Q_A^2(t) \rangle_c}{t} &\simeq \frac{1}{L} r_A (1 - r_A) - \frac{2}{L^{3/2}} r_A \sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda}} C_1(\bar{\gamma}) \\ \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} &\simeq \frac{1}{L^{(5-n)/2}} \frac{n!}{(n/2)!} \frac{8\pi^2 \sqrt{3\Lambda r_A r_B r_C}}{\Delta^{3/2}} \left[\frac{-r_A \Delta^2}{8\pi^2 \Lambda} \right]^{n/2} C_{n/2}(\bar{\gamma}) \text{ pour } n \text{ pair},\end{aligned}\quad (16.9)$$

en utilisant la définition (18.7) des $C_n(\bar{\gamma})$. La divergence des cumulants avec L est donc plus faible dans ce cas : $\langle Q_A^n(t) \rangle_c / t \propto L^{(n-5)/2}$ au lieu de $\langle Q_A^n(t) \rangle_c / t \propto L^{n-5/2}$.

Fluctuations de courant hors du régime critique

Dans ce chapitre, nous calculons les statistiques du courant $Q_A(t)$, pour le modèle ABC , dans des systèmes loin du point critique ($\beta \neq \beta_*$). Dans de tels systèmes, le courant Q_A suit une loi de Fick normale : ses cumulants décroissent en $1/L$ (voir en $1/L^2$ dans la phase plate). En revanche, les coefficients de cette décroissance divergent lorsque $\beta \rightarrow \beta_*$. Nous montrons ci-dessous que (17.10), dans la phase plate ($\beta < \beta_*$),

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\langle Q_A(t) \rangle}{t} \simeq \frac{A_1}{L} + \frac{B_1}{L^2(\beta - \beta_*)} \\ \frac{\langle Q_A^2(t) \rangle_c}{t} \simeq \frac{A_2}{L} + \frac{B_2}{L^2(\beta - \beta_*)^3} \\ \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} \simeq \frac{B_3}{L^2(\beta - \beta_*)^{2n-1}}. \end{array} \right.$$

Dans la phase modulée ($\beta > \beta_*$), nous avons calculé les deux premiers cumulants de $Q_A(t)$: le second diverge pour $\beta \rightarrow \beta_*^+$ comme

$$\frac{\langle Q_A^2(t) \rangle_c}{t} \simeq \frac{B'_2}{L(\beta - \beta_*)}. \quad (17.1)$$

Ces divergences sont compatibles avec les expressions anormales des cumulants, (16.5) et (16.6), que nous avons calculées au point critique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\langle Q_A(t) \rangle}{t} \simeq \frac{A_1}{L} + \frac{1}{L^{3/2}} F_1(\sqrt{L}(\beta - \beta_*)) \\ \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} \simeq \frac{1}{L^{5/2-n}} F_1(\sqrt{L}(\beta - \beta_*)). \end{array} \right.$$

Ces expressions donnant les cumulants en fonction de fonctions $C_n(\bar{\gamma})$ que nous ne connaissons par pour $n \geq 2$, nous ne pouvons pas vérifier complètement qu'elles se raccordent bien à (17.10) et (17.20). Toutefois, nous pouvons vérifier que leurs dépendances en $(r_A, r_B, r_C, \bar{\gamma})$ sont compatibles (17.12), (17.21).

17.1 Cumulants du courant dans la phase plate

Nous nous intéressons tout d'abord aux fluctuations de $Q_A(t)$ dans la phase plate $\beta < \beta_*$, dans laquelle les profils de densité dans l'état stationnaire $\bar{\rho}_a(x)$ sont constants. Dans cette phase, le modèle ABC se comporte, du point de vue macroscopique, de manière très semblable à un système diffusif périodique conservant une quantité : l'approche développée dans cette section est ainsi une généralisation au modèle ABC de celle utilisée par Appert, Derrida, Lecomte et van Wijland dans [2] et résumée dans la section 3.2.

Commençons par formuler l'hydrodynamique fluctuante (13.7) sous la forme d'une théorie macroscopique des fluctuations. Les trois champs de densité et de courant du modèle ABC étant reliés par les relations $\rho_A + \rho_B + \rho_C = 1$ et $j_A + j_B + j_C = 0$, nous introduisons

$$\rho(x, \tau) = \begin{pmatrix} \rho_A(x, \tau) \\ \rho_B(x, \tau) \end{pmatrix} \text{ et } j(x, \tau) = \begin{pmatrix} j_A(x, \tau) \\ j_B(x, \tau) \end{pmatrix}.$$

L'hydrodynamique fluctuante (13.7) se met alors sous la forme

$$\text{Pro}[\rho(x, \tau)] \propto \exp \left[-L \iint dx d\tau \frac{1}{2} (j - q) \cdot \sigma^{-1} (j - q) \right] \quad (17.2)$$

en posant

$$q = \begin{pmatrix} -\partial_x \rho_A + \beta \rho_A (\rho_C - \rho_B) \\ -\partial_x \rho_B + \beta \rho_B (\rho_A - \rho_C) \end{pmatrix} \text{ et } \sigma = 2 \begin{pmatrix} \rho_A(1 - \rho_A) & -\rho_A \rho_B \\ -\rho_A \rho_B & \rho_B(1 - \rho_B) \end{pmatrix}. \quad (17.3)$$

À partir de (17.2), $\langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle$ s'obtient donc en résolvant le problème variationnel

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \max_{\rho, j} L \int_0^{t/L^2} d\tau \int_0^1 dx \left[\lambda j_A - \frac{1}{2} (j - q) \cdot \sigma^{-1} (j - q) \right]. \quad (17.4)$$

Notre connaissance des profils stationnaires, $\bar{\rho}_a(x) = r_a$, dans la phase plate indique que, pour $\lambda = 0$, les profils optimaux pour ce problème sont $\rho(x, \tau) = r = \begin{pmatrix} r_A \\ r_B \end{pmatrix}$. Nous allons montrer ci-dessous que les profils optimaux restent plats même pour $\lambda \neq 0$, et prennent alors pour valeurs

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) = r \\ j(x, \tau) = J(\lambda) \end{cases} \text{ avec } J(\lambda) = q + \sigma \begin{pmatrix} \lambda \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (17.5)$$

q et σ prenant leurs valeurs (constantes) pour $\rho(x, \tau) = r$. La substitution de (17.5) dans (17.4) nous conduit à

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) \text{ avec } F_{\text{plat}}(\lambda) = \beta \lambda r_A (r_C - r_B) + \lambda^2 r_A (1 - r_A);$$

ainsi, dans la phase plate, les fluctuations de $Q_A(t)$ sont gaussiennes, avec

$$\langle Q_A(t) \rangle \simeq \frac{t}{L} \beta r_A (r_C - r_B), \quad \langle Q_A^2(t) \rangle_c \simeq \frac{t}{L} 2 r_A (1 - r_A) \text{ et } \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} = o\left(\frac{1}{L}\right). \quad (17.6)$$

Pour vérifier que (17.5) sont bien les profils optimaux de (17.4), nous considérons une petite fluctuation de (ρ, j) autour de $(r, J(\lambda))$. Par analogie avec le cas d'un système diffusif conservant une quantité (3.7), nous décrivons cette perturbation en terme de ses modes de Fourier spatiaux et temporels :

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) = r + \sum_{k, \omega} k [\alpha_{k\omega} e^{i(kx - \omega\tau)} + \text{cc.}] \\ j(x, \tau) = J(\lambda) + \sum_{k, \omega} \omega [\alpha_{k\omega} e^{i(kx - \omega\tau)} + \text{cc.}] \end{cases}.$$

Les amplitudes $\alpha_{k\omega} = \begin{pmatrix} \alpha_{k\omega}^{(A)} \\ \alpha_{k\omega}^{(B)} \end{pmatrix}$ sont des grandeurs $2D$ complexes ; le nombre d'onde k et la pulsation ω prennent quant à eux les valeurs discrètes

$$\begin{cases} k = 2\pi n & \text{pour } n \in \mathbb{N}^* \\ \omega = \frac{2\pi n}{t/L^2} & \text{pour } m \in \mathbb{Z}^* \end{cases} \quad (17.7)$$

À l'ordre dominant en les $\alpha_{k\omega}$, le membre de droite de (17.4) prend la forme

$$L \int_0^{t/L^2} d\tau \int_0^1 dx \left[\lambda j_A - \frac{1}{2} (j - q) \cdot \sigma^{-1} (j - q) \right] \simeq \frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) - \frac{1}{2} \sum_{k, \omega} \alpha_{k\omega}^* M_{k\omega} \alpha_{k\omega}$$

où

$$M_{k\omega} = \begin{pmatrix} \phi_A + \phi_C & \phi_C - 6i\beta k^3 \\ \phi_C + 6i\beta k^3 & \phi_B + \phi_C \end{pmatrix} \text{ avec } \phi_a = \frac{(J_a(\lambda)k - \omega r_a)^2}{r_a^3} + \frac{k^4}{r_a} + \beta^2 k^2 (4 - 9r_a).$$

Il est facile de vérifier que $M_{k\omega}$ est nécessairement définie positive : ainsi, les profils plats (17.5) sont bien un optimum local stable du principe variationnel (17.4). Puisque nous avons choisi de limiter notre étude à la région $\Lambda > 0$ où la transition est du second ordre, nous savons également, par hypothèse, que la phase plate $\bar{\rho}_a(x) = r_a$ est la seule phase plate pour $\beta < \beta_*$, c'est à dire que le profil plat (17.5) est un maximum global pour (17.4) lorsque $\lambda = 0$: il semble donc raisonnable de supposer que cet optimum reste global pour λ petit.

La connaissance des petites fluctuations de (ρ, j) autour de (17.5) nous permet ensuite de calculer les cumulants de $Q_A(t)$ à l'ordre sous-dominant en L . Pour cela, nous interprétons, par analogie avec [2], la théorie macroscopique des fluctuations sous la forme d'une intégrale fonctionnelle :

$$\begin{aligned} \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle &\propto \int D[\rho] D[j] \exp \left[\frac{t}{L} \iint dx d\tau \left(\lambda j_A - \frac{1}{2} (j - q) \cdot \sigma^{-1} (j - q) \right) \right] \\ &\simeq \int \left[\prod_{k, \omega} d\alpha_{k\omega} d\alpha_{k\omega}^* \right] \exp \left[\frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) - \frac{1}{2} \sum_{k, \omega} \alpha_{k\omega}^* M_{k\omega} \alpha_{k\omega} \right]. \end{aligned}$$

L'intégrale des petites fluctuations autour de $(r, J(\lambda))$ prend donc la forme d'une intégrale gaussienne (complexe) sur les $\alpha_{k\omega}$: après avoir réalisé celle-ci, nous obtenons donc

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) - \sum_{k,\omega} \log P_k(\omega, \lambda) + K$$

avec

$$P_k(\omega, \lambda) = \det M_{k\omega} = \phi_A \phi_B + \phi_B \phi_C + \phi_C \phi_A - 36\beta^2 k^6$$

un polynôme de degré 4 en ω , et K une constante additive servant à garantir que $\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle = 0$ lorsque $\lambda = 0$.

Dans la limite $t \rightarrow \infty$, le spectre en ω (17.7) devient continu, au contraire du spectre en k : nous pouvons donc remplacer la somme sur ω par une intégrale, ce qui conduit à

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) - \frac{t}{2\pi L^2} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \log P_k(\omega, \lambda) + K. \quad (17.8)$$

L'intégrale des petites fluctuations de (ρ, j) autour de $(r, J(\lambda))$ donne donc lieu à des corrections en t/L^2 aux cumulants de $Q_A(t)$. Contrairement au cas des systèmes conservant une quantité, il nous a été impossible d'obtenir une expression analytique de ces corrections ; en revanche, nous avons pu voir qu'elles divergent pour $\beta \rightarrow \beta_*$, et nous avons été en mesure de calculer explicitement cette divergence.

L'analyse de stabilité (13.8) indiquant que seul le premier mode de Fourier spatial des $\rho_a(x, \tau)$ se déstabilise lorsque $\beta \rightarrow \beta_*$, nous avons considéré le terme $k = 2\pi$ de (17.8) comme seul responsable de la divergence des corrections aux cumulants de $Q_A(t)$ à β_* . Notre connaissance du régime critique (chapitre 14), dans lequel ce même mode évolue sur une échelle de temps lente, d'ordre $L^{5/2}$ (14.14), suggère également que les fluctuations lentes ($\omega \simeq 0$) sont à l'origine de cette divergence.

Or, au premier ordre en (λ, ω) autour de $\lambda = 0$ (pour obtenir les cumulants de $Q_A(t)$) et $\omega = 0$, $P_k(\omega, \lambda)$ s'approxime par

$$P_k(\omega, \lambda) \simeq k^4 \left[\frac{\omega^2 + k^2 \Delta(\beta - \beta_k)^2}{r_A r_B r_C} + 12\beta_k^3 (r_C - r_B) \lambda \right] \equiv Q_k(\omega, \lambda) \quad (17.9)$$

pour $\beta \simeq \beta_k = k/\sqrt{\Delta}$ la valeur (13.9) de β pour lequel le k -ième mode se déstabilise.

Nous cherchons donc à calculer $\int d\omega \log P_{2\pi}(\omega, \lambda) \simeq \int d\omega \log Q_{2\pi}(\omega, \lambda)$. Or, cette dernière intégrale est en apparence divergente : en effet,

$$\int_{-\Omega}^{\Omega} d\omega \log Q_{2\pi}(\omega, \lambda) \underset{\Omega \rightarrow \infty}{\simeq} 4\Omega \log \Omega + i\pi[\omega_+ - \omega_-]$$

où ω_+ (resp. ω_-) est la racine en ω de $Q_{2\pi}(\omega, \lambda)$ de partie imaginaire positive (resp. négative). Toutefois, la présence d'une constante K destinée à garantir $\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle = 0$ pour $\lambda = 0$ dans (17.8) vient compenser cette divergence en $\Omega \log \Omega$: nous obtenons donc, sachant que

$$\omega_{\pm} = \pm 2i\pi \sqrt{\Delta(\beta - \beta_*)^2 + \frac{24\pi}{\Delta^{3/2}} r_A r_B r_C (r_B - r_C) \lambda},$$

une contribution à $\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle$ de la forme suivante :

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) + \frac{4\pi^2 t}{L^2} \frac{\beta - \beta_*}{\beta_*} \left[\sqrt{1 + \frac{24\pi}{\Delta^{5/2}} \frac{r_A r_B r_C}{(\beta - \beta_*)^2} (r_B - r_C) \lambda} - 1 \right].$$

La correction à $\langle Q_A^n(t) \rangle_c$ correspondante prend la forme

$$\frac{t}{L^2(\beta - \beta_*)^{2n-1}} \sqrt{\frac{\Delta}{\pi}} \Gamma(n - 1/2) \left[\frac{24\pi r_A r_B r_C (r_C - r_B)}{\Delta^{5/2}} \right]^n; \quad (17.10)$$

elle est donc bien divergente lorsque $\beta \rightarrow \beta_*^-$. De plus, cette correction est compatible avec la forme des cumulants (16.6) que nous avons obtenue dans le régime critique, soit

$$\begin{aligned} \frac{\langle Q_A(t) \rangle}{t} &\simeq \frac{1}{L} \beta r_A (r_C - r_B) + \frac{2}{L^{3/2}} \beta (r_B - r_C) \sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda}} C_1(\bar{\gamma}) \\ \frac{\langle Q_A^n(t) \rangle_c}{t} &\simeq \frac{1}{L^{5/2-n}} \frac{8\pi^2 \sqrt{3\Lambda r_A r_B r_C}}{\Delta^{3/2}} \left[\frac{\Delta^{3/2} (r_B - r_C)}{2\pi\Lambda} \right]^n C_n(\bar{\gamma}) \end{aligned} \quad (17.11)$$

avec $\bar{\gamma} \propto \sqrt{L}(\beta - \beta_*)$ donné par (14.16). Pour que (17.10) et (17.11) soient compatibles, il est nécessaire que

$$C_n(\bar{\gamma}) \underset{\bar{\gamma} \rightarrow -\infty}{\simeq} \frac{(-1)^n \Gamma(n - 1/2)}{4\sqrt{\pi} \bar{\gamma}^{2n-1}}; \quad (17.12)$$

nous pouvons vérifier que c'est bien le cas pour $n = 1$ à partir de l'expression explicite (15.2) de $C_1(\bar{\gamma})$, dont on peut déduire $C_1(\bar{\gamma}) \underset{\bar{\gamma} \rightarrow -\infty}{\simeq} 1/2\bar{\gamma}$.

Cas des densités égales

Lorsque $r_B = r_C$, le développement (17.9) de $P_k(\omega, \lambda)$ autour de $\omega = 0$, $\lambda = 0$ et $\beta = \beta_k$ est remplacé par

$$P_k(\omega, \lambda) \simeq k^4 \left[\frac{\left(\omega + \lambda k \left(\frac{5\Lambda + r_A^2}{\Delta} - 2 \right) \right)^2 + k^2 \Delta (\beta - \beta_k)^2}{r_A r_B r_C} + 6\beta_k^2 \left(\frac{\Lambda}{\Delta} + 1 \right) \lambda^2 \right].$$

L'intégration de $\log P_{2\pi}(\omega, \lambda)$ donne alors

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \frac{t}{L} F_{\text{plat}}(\lambda) + \frac{4\pi^2 t}{L^2} \frac{\beta - \beta_*}{\beta_*} \left[\sqrt{1 + \frac{6(\Lambda + \Delta)}{\Delta^3 (\beta - \beta_*)^2} \lambda^2} - 1 \right],$$

soit une correction au n -ième cumulant $\langle Q_A^n(t) \rangle_c$ égale, pour n pair, à

$$-\frac{t}{L^2(\beta - \beta_*)^{n-1}} \frac{n! \Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{(n/2)!} \sqrt{\frac{\Delta}{\pi}} \left[-6 \frac{\Lambda + \Delta}{\Delta^3} \right]^{n/2}.$$

On peut alors vérifier que cette expression correspond à celle obtenue en prenant la limite $\bar{\gamma} \rightarrow -\infty$ de l'expression de $\langle Q_A^n(t) \rangle_c$ dans le régime critique (16.9) en supposant que $C_n(\bar{\gamma})$ obéit à (17.12).

17.2 Calculs numériques dans la phase modulée

Dans la phase modulée $\beta > \beta_*$, les profils de densité $\bar{\rho}_a(x)$ dans l'état stationnaire, qui correspondent également à l'optimum de (17.4) pour $\lambda = 0$, prennent des expressions très complexes [24] : il semble donc très difficile de déterminer cet optimum analytiquement pour $\lambda \neq 0$ (comme c'est le cas dans la phase plate). Dans cette section, nous analysons perturbativement $\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle$ perturbativement autour de $\lambda = 0$: ceci nous permet de calculer numériquement les deux premiers cumulants de $Q_A(t)$ à l'ordre dominant en L pour $\beta > \beta_*$.

De plus, les profils $\bar{\rho}_a(x)$ sont connus analytiquement au premier ordre en $\beta - \beta_*$ pour $\beta \rightarrow \beta_*^+$ (13.11). À partir de ceci, nous avons pu calculer analytiquement les deux premiers cumulants de $Q_A(t)$ pour $\beta \gtrsim \beta_*$, mettant ainsi en évidence la divergence du coefficient de la loi de Fourier normale suivie par $\langle Q_A^2(t) \rangle_c$ pour $\beta \rightarrow \beta_*^+$ (17.1).

Considérons l'expression variationnelle (17.4) de $\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle$:

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \max_{\rho, j} L \int_0^{t/L^2} d\tau \int_0^1 dx \left[\lambda j_A - \frac{1}{2} (j - q) \cdot \sigma^{-1} (j - q) \right]. \quad (17.13)$$

Dans la phase modulée $\beta > \beta_*$, les optima de (17.13) s'expriment, pour $\lambda = 0$, à partir des profils de densité stationnaires $\bar{\rho}_a(x)$ comme

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) = \bar{\rho}(x + \varphi) \\ j(x, \tau) = \bar{q} \end{cases} \quad \text{avec } \bar{\rho}(x) = \begin{pmatrix} \bar{\rho}_A(x) \\ \bar{\rho}_B(x) \end{pmatrix} \text{ et } \bar{q} = \begin{pmatrix} \bar{q}_A \\ \bar{q}_B \end{pmatrix} \quad (17.14)$$

où les \bar{q}_a sont les courants de particules associés aux profils stationnaires $\bar{\rho}_a(x)$: ceux-ci étant, par construction, solutions stationnaires des équations hydrodynamiques (13.5), les courants \bar{q}_a sont constants, de valeur

$$\bar{q}_a = \beta \int_0^1 dx \bar{\rho}_a(x) (\bar{\rho}_c(x) - \bar{\rho}_b(x)).$$

De plus, le système étant invariant par translation, toutes les translations arbitraires de ces profils sont également stables, d'où l'apparition d'une phase $\varphi \in [0, 1]$ arbitraire dans (17.14).

Pour calculer les premiers cumulants de $Q_A(t)$, nous supposons que, pour λ petit, l'optimum (ρ, j) de (17.13) peut s'obtenir en déformant légèrement l'optimum (17.14). Nous supposons que cet optimum change peu de forme, mais tourne éventuellement à une petite vitesse v en raison de l'invariance de (17.14) en la phase φ . Nous permettons à $\rho(x, \tau)$ de différer légèrement de $\bar{\rho}$ et à $j(x, \tau)$ de s'écarter un peu de \bar{q} , soit

$$\begin{cases} \rho(x, \tau) = \bar{\rho}(x - v\tau) + \mu(x - v\tau) \\ j(x, \tau) = \bar{q} + K - v\bar{\rho}(x - v\tau) \end{cases} \quad \text{avec } \mu, K = \begin{pmatrix} K_A \\ K_B \end{pmatrix}, v \text{ petits.} \quad (17.15)$$

Pour injecter (17.15) dans (17.13), il nous faut développer $q(\rho)$ au premier ordre : à partir de sa définition (17.3), on peut montrer que

$$q \simeq \bar{q} - \mu' - \bar{M}\mu \quad \text{avec } \bar{M} = \beta \begin{pmatrix} 1 - 2\bar{\rho}_C & 2\bar{\rho}_A \\ -2\bar{\rho}_B & 2\bar{\rho}_C - 1 \end{pmatrix}$$

et $\mu' = \partial_x \mu$. Nous obtenons ainsi , au premier ordre non trivial dans (17.13),

$$\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle \simeq \frac{t}{L} \max_{\mu(x), K, v} \int dx [\lambda(\bar{q}_A + K_A - v\bar{\rho}_A) - \frac{1}{2}(K - v\bar{\rho} + \mu' + \bar{M}\mu) \cdot \bar{\sigma}^{-1}(K - v\bar{\rho} + \mu' + \bar{M}\mu)] \quad (17.16)$$

en posant $\bar{\sigma} = \sigma(\bar{\rho})$. Dans ce problème variationnel simplifié, les équations d'optimisation sur $\mu(x)$, K et v sont toutes linéaires, et peuvent se mettre respectivement sous la forme

$$\begin{cases} F' = \bar{M}^T F \\ \int dx F(x) = \begin{pmatrix} \lambda \\ 0 \end{pmatrix} \text{ avec } F(x) = \bar{\sigma}^{-1}(K - v\bar{\rho} + \mu' + \bar{M}\mu) . \\ \int dx \bar{\rho}(x) \cdot F(x) = \lambda r_A \end{cases} \quad (17.17)$$

Les équations d'optimisation ci-dessus peuvent donc s'écrire exclusivement en termes de la seule fonction $F(x)$. De plus, la valeur optimale de (17.16) peut aussi s'exprimer à l'aide de $F(x)$: en effet,

$$\begin{aligned} \int dx F \cdot \bar{\sigma} F &= \int dx F \cdot (K - v\bar{\rho} + \mu' + \bar{M}\mu) \\ &= K \cdot \int dx F - v \int dx \bar{\rho} \cdot F + \int dx \mu \cdot (\bar{M}^T F - F') \\ &= \lambda(K_A - v r_A) \end{aligned}$$

en utilisant les équations (17.17). Par conséquent, à l'optimum en $F(x)$,

$$\begin{aligned} \log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle &\simeq \frac{t}{L} \int dx \left[\lambda(\bar{q}_A + K_A - v\bar{\rho}_A) - \frac{1}{2} F \cdot \bar{\sigma} F \right] \\ &\simeq \frac{t}{L} \left[\lambda \bar{q}_A + \frac{1}{2} \int dx F \cdot \bar{\sigma} F \right] . \end{aligned} \quad (17.18)$$

Ceci nous a permis de déterminer numériquement $\log \langle e^{\lambda Q_A(t)} \rangle$ dans la phase modulée, à l'ordre 2 en λ et à l'ordre dominant en L , en calculant successivement $\bar{\rho}(x)$ (à partir des équations hydrodynamiques (13.5)) puis $F(x)$ (à l'aide des équations d'optimisation (17.17)), et enfin en intégrant (17.18). Les résultats obtenus sont présentés dans la figure 17.1 pour $r_A = r_B = 1/4$ et $\beta_* \leq \beta \leq 2\beta_*$.

Dans le cas du deuxième cumulant $\langle Q_A^2(t) \rangle_c$, cette prédiction semble diverger lorsque $\beta \rightarrow \beta_*^+$. À l'aide de l'expression approchée (13.11) des profils stationnaires $\bar{\rho}_a(x)$ dans cette limite, nous pouvons déterminer cette divergence analytiquement lorsque $r_B \neq r_C$ (il n'y a pas de divergence pour $r_B = r_C$). (13.11) permet de résoudre les équations d'optimisation (17.17) de $F(x)$ à l'ordre dominant en $\beta - \beta_*$: nous obtenons ainsi

$$F(x) = \frac{4\pi\lambda(r_B - r_C)}{\Delta^{3/2}(\beta - \beta_*)} \begin{pmatrix} R_B \\ -R_A \end{pmatrix} e^{2i\pi x} + \text{cc.} + \mathcal{O}(1)$$

où les R_a sont les premiers modes de Fourier de $\bar{\rho}_a(x)$ (13.11). Le premier mode de Fourier de $F(x)$ diverge donc à β_* , puisque $|R_A| \propto \sqrt{\beta - \beta_*}$ (13.12) : l'intégration de (17.18) mène à

$$\frac{\langle Q_A(t) \rangle}{t} \underset{\beta \downarrow \beta_*}{\simeq} \frac{r_C - r_B}{L} \left[\beta r_A - \frac{\Delta^2}{\Lambda} (\beta - \beta_*) \right] \quad (17.19)$$

$$\frac{\langle Q_A^2(t) \rangle_c}{t} \underset{\beta \downarrow \beta_*}{\simeq} \frac{1}{L} \frac{12\pi r_A r_B r_C (r_B - r_C)^2}{\sqrt{\Delta} \Lambda (\beta - \beta_*)}. \quad (17.20)$$

Ces deux expressions sont bien compatibles avec celles obtenues dans le régime critique. Pour le premier cumulant, la limite $\bar{\gamma} \rightarrow \infty$ de (16.5) peut se calculer exactement en utilisant l'expression exacte (15.2) de $C_1(\bar{\gamma})$, et coïncide bien avec (17.19). Dans le cas du second cumulant, nous pouvons vérifier que la dépendance en $(r_A, r_B, r_C, \bar{\gamma})$ de (16.6) est bien compatible avec (17.20), en supposant que

$$C_2(\bar{\gamma}) \underset{\bar{\gamma} \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{2}{\bar{\gamma}}. \quad (17.21)$$

17.3 Simulations des premier et deuxième cumulants

Dans les sections précédentes, nous avons calculé les coefficients des lois de Fourier normales suivies, pour $\beta \neq \beta_*$, par les deux premiers cumulants du courant $Q_A(t)$ dans le modèle *ABC*. Nous comparons ici ces prédictions à des mesures numériques, réalisées pour $r_A = r_B = 1/4$ et $0 \leq \beta \leq 2\beta_*$ dans des systèmes de $80 \leq L \leq 640$ particules. Nous avons aussi pu étudier le régime critique (16.5) pour $|\beta - \beta_*| \sim 1/\sqrt{L}$.

Dans la figure 17.1, nous comparons aux simulations numériques les coefficients des lois de Fourier normales de $\langle Q_A(t) \rangle$ et $\langle Q_A^2(t) \rangle_c$, obtenus dans la section 17.1 pour $\beta < \beta_*$ et dans la section 17.2 pour $\beta > \beta_*$. Dans la phase plate, les expressions de ces lois sont simples (17.6) :

$$\begin{cases} \langle Q_A(t) \rangle^{(\text{norm})} = \frac{t}{L} \beta r_A (r_C - r_B) \\ \langle Q_A^2(t) \rangle_c^{(\text{norm})} = \frac{t}{L} 2r_A (1 - r_A) \end{cases} \quad (17.22)$$

En revanche, dans la phase modulée $\beta > \beta_*$, les coefficients des lois de Fourier normales ne sont accessibles qu'en calculant numériquement la forme des profils de densité stationnaires $\bar{\rho}_a(x)$, ainsi que la fonction auxiliaire $F(x)$ définie par (17.17) : alors (17.18)

$$\begin{cases} \langle Q_A(t) \rangle^{(\text{norm})} = \frac{t}{L} \beta \int_0^1 dx \bar{\rho}_A(x) [\bar{\rho}_C(x) - \bar{\rho}_B(x)] \\ \langle Q_A^2(t) \rangle_c^{(\text{norm})} = \frac{t}{L} \int dx G \cdot \bar{\sigma} G \end{cases} \quad (17.23)$$

où $G(x) = F(x)/\lambda$. Nous connaissons néanmoins analytiquement le comportement de ces coefficients pour $\beta \gtrsim \beta_*$ (17.19), (17.20) : la loi de Fourier normale du premier cumulant présente donc un point anguleux en β_* , tandis que celle du second cumulant diverge en $1/(\beta - \beta_*)$ à droite de β_* . Dans les systèmes finis que nous avons étudiés numériquement,

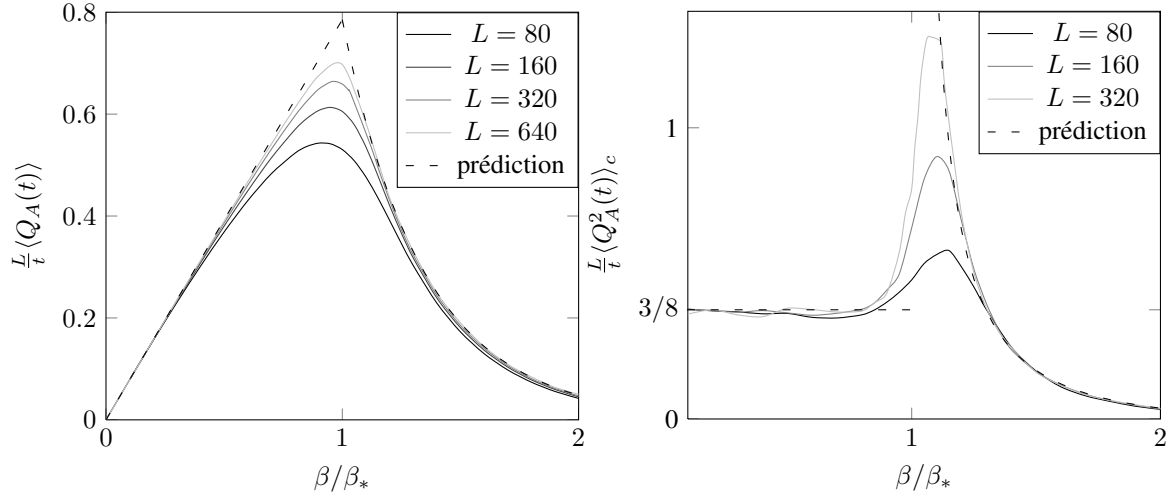


FIGURE 17.1 – Premier et deuxième cumulants du courant $Q_A(t)$ dans le modèle ABC pour $r_A = r_B = 1/4$ et $0 \leq \beta \leq 2\beta_*$. Les coefficients des lois de Fourier normales suivies par les cumulants pour $\beta \neq \beta_*$, qui prennent une forme simple pour $\beta < \beta_*$ (17.22) mais doivent être calculés numériquement pour $\beta > \beta_*$ (17.23), sont comparés à des mesures numériques sur des systèmes de $80 \leq L \leq 640$ particules.

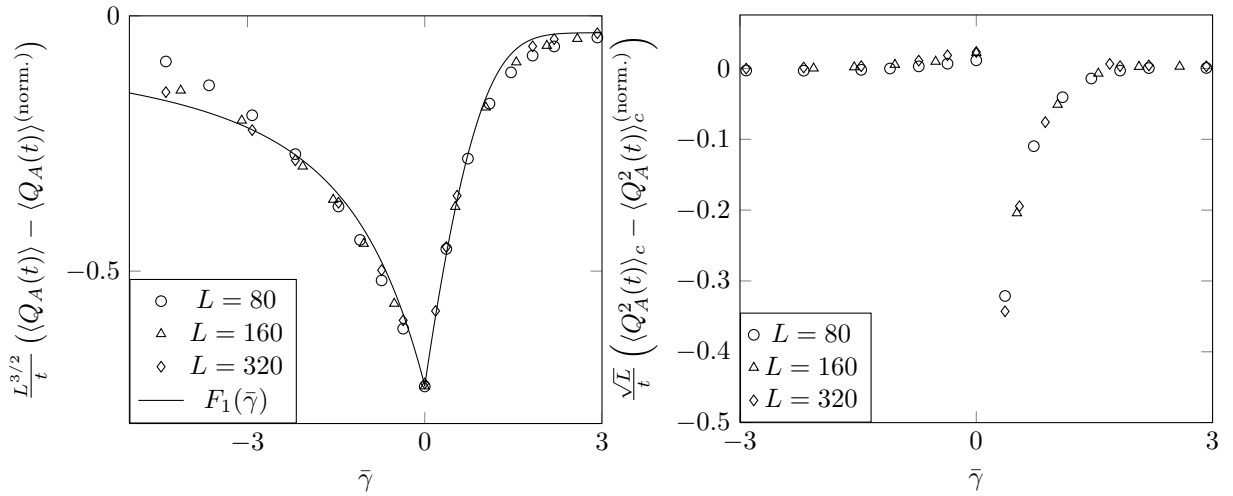


FIGURE 17.2 – Écarts des deux premiers cumulants de $Q_A(t)$ à leurs lois de Fourier normales (17.22) et (17.23), en fonction de l'écart rescalé au point critique (14.16) $\bar{\gamma} \propto \sqrt{L}(\beta - \beta_*)$. L'analyse du régime critique (17.24) permet de prédire cet écart pour le premier cumulant, et donne sa dépendance en L (17.25) dans le cas du second.

$\langle Q_A^2(t) \rangle_c$ reste fini pour $\beta \simeq \beta_*$, mais décroît alors moins vite que $1/L$, donnant lieu à la loi de Fourier anormale (16.6).

Dans la figure 17.2, nous étudions plus précisément le comportement de $\langle Q_A(t) \rangle$ au voisinage du point critique β_* . Notre étude du régime critique (chapitre 16) prédit que,

lorsque $\beta - \beta_*$ est d'ordre $1/\sqrt{L}$,

$$\langle Q_A(t) \rangle - \langle Q_A(t) \rangle^{(\text{norm.})} \simeq \frac{t}{L^{3/2}} 2\beta(r_B - r_C) \sqrt{\frac{3\Delta r_A r_B r_C}{\Lambda}} [C_1(\bar{\gamma}) - \bar{\gamma}\theta(\bar{\gamma})] \quad (17.24)$$

$$\langle Q_A^2(t) \rangle_c - \langle Q_A^2(t) \rangle_c^{(\text{norm.})} \simeq \frac{t}{\sqrt{L}} 2(r_B - r_C)^2 \frac{\Delta^{3/2} \sqrt{3r_A r_B r_C}}{\Lambda^{3/2}} \left[C_2(\bar{\gamma}) - \frac{2}{\bar{\gamma}} \right]. \quad (17.25)$$

Pour le premier cumulant, l'expression (15.2) de $C_1(\bar{\gamma})$ nous permet de vérifier que les mesures numériques sont en bon accord avec cette prédiction ; pour le second cumulant, en l'absence d'expression analytique de $C_2(\bar{\gamma})$, nous ne pouvons que vérifier l'exactitude de la forme d'échelle (17.25).

Corrélations et courant en régime tricritique

Un des points les plus discutés de l'étude des systèmes mécaniques présentant une loi de Fourier anormale (partie II) est l'existence d'une ou plusieurs classes d'universalité présentant des exposants d'anomalie α différents (section 9.2).

Dans le cas du modèle ABC , nous avons mis en évidence dans le chapitre 16 l'existence d'une telle anomalie des fluctuations de courant au voisinage de la transition du second ordre du modèle, avec les exposants

$$\langle Q_A^n(t) \rangle_c \propto \frac{t}{L^{5/2-n}}$$

dans le cas général. Nous nous intéressons ici au comportement du modèle le long de la ligne tricritique $\Lambda = 0$ (figure 13.1) qui sépare les régions où la transition de phase est du second ordre ($\Lambda \geq 0$) ou du premier ordre ($\Lambda < 0$). Sur cette ligne, l'équation d'évolution effective du premier mode de Fourier des densités (14.11) dans le régime critique,

$$\frac{dR_A}{d\tau} = 4\pi^2 \left[\gamma - \frac{2\Lambda}{\Delta^2} \frac{|R_A|^2}{r_A} \right] R_A + \frac{\mu_A}{\sqrt{L}}, \quad (18.1)$$

devient dégénérée : son terme d'amortissement disparaît. Nous montrons ci-dessous qu'il est remplacé, lorsque $\Lambda = 0$, par

$$\frac{dR_A}{d\tau} = 4\pi^2 \left[\gamma - \frac{|R_A|^4}{r_A^2 \Delta^2} \right] R_A + \frac{\mu_A}{\sqrt{L}},$$

d'où nous déduisons une anomalie des fluctuations de $Q_A(t)$ de la forme

$$\langle Q_A^n(t) \rangle_c \propto \frac{t}{L^{4(2-n)/3}}.$$

Ainsi, l'exposant de la loi de Fourier anormale du modèle ABC peut varier selon le choix des densités de particules r_A , r_B et r_C .

18.1 Hydrodynamique fluctuante tricritique

Pour obtenir l'équation d'évolution effective (18.1) pour $\Lambda = 0$, nous reprenons ici l'approche suivie dans le chapitre 14. Nous considérons tout d'abord l'équation d'évolution déterministe (13.6)

$$\begin{cases} \partial_\tau \rho_a = -\partial_x j_a \\ j_a = -\partial_x \rho_a + \beta \rho_a (\rho_c - \rho_b) \end{cases} \quad (18.2)$$

dans laquelle nous recherchons des solutions $\rho_a(x, \tau)$ évoluant lentement et dominées par leur premier mode de Fourier $R_a(\tau)$:

$$\begin{cases} \rho_a(x, \tau) = r_a + (R_a(\tau)e^{2i\pi x} + \text{cc.}) + \tilde{\rho}_a(x, \tau) \\ j_a(x, \tau) = J_a(\tau) + \left(\frac{i}{2\pi} \dot{R}_a(\tau)e^{2i\pi x} + \text{cc.} \right) - \partial_\tau \int_0^x dy \tilde{\rho}_a(y, \tau) \end{cases}$$

avec $\tilde{\rho}_a \ll R_a \ll r_a$ et $\dot{R}_a \ll R_a$ et $\partial_\tau \tilde{\rho}_a \ll \tilde{\rho}_a$. Dans la partie 14.1, nous avons montré que, sous ces hypothèses, l'ordre dominant de (18.2) implique

$$\begin{cases} R_B(\tau) = \frac{2r_C - 1 - i\sqrt{\Delta}}{2r_A} R_A(\tau) + x_B(\tau) \\ R_C(\tau) = \frac{2r_B - 1 + i\sqrt{\Delta}}{2r_A} R_A(\tau) + x_C(\tau) \end{cases} \quad \text{avec } x_B, x_C \ll R_A \quad (18.3)$$

ainsi que

$$\tilde{\rho}_a(x, \tau) \simeq \varphi_a e^{4i\pi x} + \text{cc.} \quad \text{avec } \varphi_a(\tau) = \frac{1 - 2r_a}{\Delta} R_a^2(\tau).$$

Pour $\Lambda = 0$, la contribution au premier mode de Fourier de (18.2) à l'ordre sous-dominant, qui permet *a priori* de calculer $\dot{R}_A(\tau)$, s'annule. Ainsi, dans ce cas, $\dot{R}_A(\tau)$ est d'un ordre inférieur : il nous faut aller à l'ordre suivant dans le premier mode de Fourier de (18.2) pour obtenir son équation d'évolution. Cela nécessite de calculer x_B, x_C et les $\tilde{\rho}_a(x, \tau)$ à l'ordre suivant.

Pour simplifier les calculs qui vont suivre, il est utile de conserver le plus longtemps possible la symétrie cyclique en $\{A, B, C\}$ des équations. Cette symétrie est brisée par la paramétrisation (18.3) de $R_B(\tau)$ et $R_C(\tau)$ en fonction de $R_A(\tau)$. Pour rétablir cette symétrie, nous choisissons de remplacer (18.3) par

$$R_a(\tau) = S_a(\tau) + y_a(\tau) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} S_B(\tau) = \frac{2r_C - 1 - i\sqrt{\Delta}}{2r_A} S_A(\tau) \\ S_C(\tau) = \frac{2r_B - 1 + i\sqrt{\Delta}}{2r_A} S_A(\tau) \end{cases}$$

Contrairement aux $x_a(\tau)$, les $y_a(\tau)$ ont des expressions symétriques en $\{A, B, C\}$. Pour les déterminer, nous considérons le deuxième ordre du premier mode de Fourier de (18.2). Sachant que $\dot{R}_a \ll R_a^3$, celui-ci prend la forme

$$(r_c - r_b - i\sqrt{\Delta})y_a + r_a(y_c - y_b) + \varphi_a(S_c^* - S_b^*) + S_a^*(\varphi_c - \varphi_b) = 0.$$

avec $\varphi_a = \frac{1-2r_a}{\Delta} S_a^2(\tau)$. En faisant la combinaison linéaire

$$(r_c - r_b + i\varepsilon\sqrt{\Delta}) \times (\text{éq. sur } y_a) - r_a \times (\text{éq. sur } y_b) + r_a \times (\text{éq. sur } y_c),$$

puis en faisant $\varepsilon \rightarrow 1$, nous aboutissons à une expression cyclique des $y_a(\tau)$:

$$y_a(\tau) = - \left[1 - \frac{1}{\Delta} - 2i \frac{(2r_b - 1)(2r_c - 1)(r_b - r_c)}{\Delta^{3/2}} \right] \frac{|S_a(\tau)|^2}{4r_a^2} S_a(\tau) + z_a(\tau)$$

avec $z_a \ll S_a^3$.

Calculons maintenant les $\tilde{\rho}_a(x, \tau)$ à l'ordre suivant. Nous posons pour cela

$$\tilde{\rho}_a(x, \tau) = [(\varphi_a(\tau) + \phi_a(\tau))e^{4i\pi x} + \text{cc.}] + \mu_a(x, \tau),$$

où $\phi_a \ll \varphi_a$ et où $\mu_a(x, \tau)$ est une fonction dont les deux premiers modes de Fourier sont nuls. À partir de (18.2), nous pouvons écrire, à l'ordre dominant, l'équation satisfaite par $\mu_a(x, \tau)$:

$$0 = -\partial_x \mu_a + \beta_* [\mu_a(r_c - r_b) + r_a(\mu_c - \mu_b) + R_a(\varphi_c - \varphi_b)e^{6i\pi x} + \text{cc.}].$$

Par conséquent, $\mu_a(x, \tau)$ est dominée par son troisième mode de Fourier,

$$\mu_a(x, \tau) \simeq \psi_a(\tau)e^{6i\pi x} + \text{cc.}$$

Les $\psi_a(\tau)$ vérifient donc

$$(r_c - r_b - 3i\sqrt{\Delta})\psi_a + r_a(\psi_c - \psi_b) + S_a(\varphi_c - \varphi_b) + \varphi_a(S_c - S_b) = 0,$$

dont la solution est

$$\psi_a(\tau) = \frac{3r_b r_c - \Delta}{\Delta^2} S_a^3(\tau).$$

L'ordre sous-dominant du 2^e mode de Fourier de (18.2) permet alors de déterminer ϕ_a :

$$(r_c - r_b - 2i\sqrt{\Delta})\phi_a + r_a(\phi_c - \phi_b) + S_a(y_c - y_b) + y_a(S_c - S_b) + \psi_a(S_c^* - S_b^*) + S_a^*(\psi_c - \psi_b) = 0.$$

Il conduit à

$$\phi_a(\tau) = \left[1 + 4 \frac{2r_a - 1}{\Delta} - i \frac{r_b - r_c}{\sqrt{\Delta}} \right] \frac{|S_a(\tau)|^2}{3r_a^2 \Delta} S_a^2(\tau).$$

Nous pouvons maintenant écrire le troisième ordre du premier mode de Fourier de (18.2) :

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\pi} \dot{S}_a = 2i\pi\gamma S_a + \beta_* \left[\psi_a(\varphi_c^* - \varphi_b^*) + \varphi_a^*(\psi_c - \psi_b) + S_a^*(\phi_c - \phi_b) + \phi_a(S_c^* - S_b^*) \right. \\ \left. + (r_c - r_b - i\sqrt{\Delta})z_a + r_a(z_c - z_b) \right]. \end{aligned} \quad (18.4)$$

En prenant la combinaison linéaire (14.8), nous pouvons éliminer les z_a , obtenant ainsi

$$\dot{S}_a = 4\pi^2 \left[\gamma - \frac{|S_a|^4}{r_a^2 \Delta} \right] S_a;$$

puisque $\dot{S}_a = \dot{R}_a$ à l'ordre dominant, R_a vérifie la même équation.

Équation d'évolution bruitée

L'ajout du bruit $\eta_a(x, \tau)$ à l'équation d'évolution (18.2),

$$\begin{cases} \partial_\tau \rho_a = -\partial_x j_a \\ j_a = -\partial_x \rho_a + \beta \rho_a (\rho_c - \rho_b) + \frac{1}{\sqrt{L}} \eta_a(x, \tau), \end{cases}$$

a pour effet, comme dans le cas critique, de faire fluctuer les $\varphi_a(\tau)$, $\phi_a(\tau)$, $\psi_a(\tau)$ et $y_a(\tau)$ intervenant dans (18.4) autour des valeurs dépendant de $S_a(\tau)$ que nous avons calculées ci-dessus. Néanmoins, l'équation (18.4) prenant la forme

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\pi} \dot{S}_a = & 2i\pi\gamma S_a + \beta_* \left[\psi_a(\varphi_c^* - \varphi_b^*) + \varphi_a^*(\psi_c - \psi_b) + S_a^*(\phi_c - \phi_b) + \phi_a(S_c^* - S_b^*) \right. \\ & \left. + (r_c - r_b - i\sqrt{\Delta})z_a + r_a(z_c - z_b) \right] + \frac{\nu_a(\tau)}{\sqrt{L}}, \end{aligned}$$

la contribution des fluctuations de ces variables à l'équation ci-dessus sont toutes dominées par ν_a/\sqrt{L} . Ainsi, après avoir pris la combinaison linéaire (14.8), nous obtenons

$$\frac{dR_A}{dt} = 4\pi^2 \left[\gamma - \frac{|R_a|^4}{r_a^2 \Delta} \right] R_a + \frac{\mu_A(\tau)}{\sqrt{L}}$$

avec la définition (14.12) de $\mu_A(\tau)$.

Le changement d'échelle correspondant à cette équation est

$$R_A(\tau) = \left[\frac{6r_A^4 r_B r_C}{L} \right]^{\frac{1}{6}} g(\tilde{\tau}) \text{ avec } \tilde{\tau} = \frac{4\pi^2}{\Delta} (6r_A r_B r_C)^{2/3} \frac{t}{L^{8/3}}; \quad (18.5)$$

alors

$$\frac{dg}{d\tilde{\tau}} = [\tilde{\gamma} - |g(\tilde{\tau})|^4]g(\tilde{\tau}) + \mu(\tilde{\tau}) \quad (18.6)$$

avec

$$\tilde{\gamma} = \frac{\Delta}{(6r_A r_B r_C)^{2/3}} L^{2/3} \frac{\beta - \beta_*}{\beta_*}$$

et $\mu(\tilde{\tau})$ un bruit blanc complexe vérifiant $\langle \mu(\tilde{\tau}) \mu^*(\tilde{\tau}') \rangle = \delta(\tilde{\tau} - \tilde{\tau}')$.

Le régime tricritique est donc atteint dans le voisinage $|\beta - \beta_*| \propto 1/L^{2/3}$ de β_* : il est caractérisé par des fluctuations du premier mode de Fourier R_A d'amplitude $L^{-1/6}$ sur une échelle de temps $\tilde{\tau}$ d'ordre $L^{8/3}$. Ces fluctuations sont donc à la fois plus lentes, et de plus grande amplitude, que celles qui caractérisent le régime critique simple (fluctuations d'amplitude $L^{-1/4}$ à l'échelle $t \propto L^{5/2}$) : nous nous attendons donc à ce que les fluctuations du courant $Q_A(t)$ soient ici d'amplitude plus importante, de même que les corrélations spatiales et temporelles des densités.

18.2 Anomalie du courant

De même que dans le régime critique (chapitre 16), les fluctuations lentes sur l'échelle $t \propto L^{8/3}$ dans le régime tricritique entraînent des fluctuations de courant anormales. Dans ce cas, (16.4) est remplacée par

$$J_A(\tau) = \beta r_A(r_C - r_B) + 2\beta(r_B - r_C) \left[\frac{6r_A r_B r_C}{L} \right]^{\frac{1}{3}} |g(\tilde{\tau})|^2 + \frac{1}{\sqrt{L}} \nu_A^{(0)}(\tau),$$

avec la définition (16.2) de $\nu_A^{(0)}$. Intégrant $J_A(\tau)$ pour obtenir $Q_A(t)$, nous aboutissons, à l'ordre dominant en L , aux expressions

$$\begin{aligned} \langle Q_A(t) \rangle &\simeq \frac{t}{L} \beta r_A(r_C - r_B) + \frac{2t}{L^{4/3}} \beta(r_B - r_C) (6r_A r_B r_C)^{1/3} D_1(\tilde{\gamma}) \\ \langle Q_A^n(t) \rangle_c &\simeq \frac{t}{L^{4(2-n)/3}} \beta_*^2 (6r_A r_B r_C)^{2/3} \left[\frac{\sqrt{\Delta}(r_B - r_C)}{\pi(6r_A r_B r_C)^{1/3}} \right]^n D_n(\tilde{\gamma}) \end{aligned}$$

en posant, par analogie avec le régime critique,

$$D_n(\tilde{\gamma}) = \lim_{\tilde{\tau} \rightarrow \infty} \frac{1}{\tilde{\tau}} \int_0^{\tilde{\tau}} d\tilde{\tau}_1 \dots d\tilde{\tau}_n \langle |g(\tilde{\tau}_1) \dots g(\tilde{\tau}_n)|^2 \rangle_c. \quad (18.7)$$

De même que les $C_n(\tilde{\gamma})$, les $D_n(\tilde{\gamma})$, intégrales de la fonction de corrélation à n points de $g(\tilde{\tau})$, n'ont pas d'expression analytique simple pour $n > 1$.

Remarquons que cette divergence des cumulants de $Q_A(t)$ est plus forte que dans le régime critique simple (16.6). Elle prend également une forme différente lorsque les densités r_B et r_C sont égales : dans ce cas, la loi anormale de $\langle Q_A^n(t) \rangle_c$ (pour n pair) devrait prendre la forme

$$\langle Q_A^n(\tilde{\tau}) \rangle_c \propto \frac{t}{L^{2(4-n)/3}}.$$

18.3 Comportement des fonctions de corrélation

Considérons maintenant l'effet du régime tricritique (18.5),(18.6) sur les corrélations spatiales et temporelles des profils de densité $\rho_a(x, \tau)$. Dans le cas des corrélations temporelles, nous avons identifié, dans le régime critique simple (section 15.2), deux régimes potentiels.

Dans le premier, le premier mode de Fourier $R_A(\tau)$ est d'amplitude suffisamment grande pour que le terme stochastique de l'équation d'évolution (18.1) puisse être négligé : c'est par exemple le cas lorsque l'on étudie, à l'échelle de temps diffusive $t \sim L^2$, la relaxation d'un système depuis une condition initiale loin de l'état stationnaire. Alors $R_A(\tau)$ décroît, pour t/L^2 suffisamment grand, comme $\tau^{-1/2}$ (15.5) : dans le cas tricritique, cette décroissance prend la forme, pour $\beta = \beta_*$,

$$R_A(\tau) = \frac{R_A(0)}{\left[1 + \frac{16\pi^2}{\tau_A^2 \Delta} |R_A(0)|^4 \tau \right]^{1/4}} \underset{\tau \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{R_A(0)}{|R_A(0)|} \sqrt{\frac{r_A}{4\pi}} \left[\frac{\Delta}{\tau} \right]^{1/4},$$

soit une décroissance en loi de puissance, $|R_A(\tau)| \propto \tau^{-1/4}$, plus lente que dans le cas critique simple.

Le deuxième régime est pertinent lorsque $R_A(\tau)$ est du même ordre de grandeur que ses fluctuations dans l'état stationnaire, ici $|R_A| \propto L^{-1/6}$. Alors l'équation bruitée (18.1)

indique que les corrélations temporelles de R_A décroissent exponentiellement sur l'échelle de temps lente, avec un coefficient déterminé par la plus grande valeur propre non nulle de l'opérateur de l'équation de Fokker-Planck associée à l'équation de Langevin (18.6). Ainsi, dans le régime tricritique, nous nous attendons à ce que, pour $t \propto L^{8/3}$,

$$\text{Pro}[s_k(0) = s_k(t)] - \sum r_a^2 \propto \frac{1}{L^{1/3}} \exp \left[-\alpha \frac{t}{L^{8/3}} \right] .$$

puisque l'équation rescalée (18.6) indique que, dans l'état stationnaire, $R_A(\tau)$ est d'ordre $L^{-1/6}$ et varie sur l'échelle de temps $\tilde{\tau} \propto t/L^{8/3}$. De même que dans le cas non bruité, les corrélations temporelles des profils sont donc plus importantes, et décroissent moins vite, dans le cas tricritique que dans le régime critique simple.

Enfin, l'amplitude plus importante des fluctuations de $R_A(\tau)$ affecte les corrélations spatiales des densités dans l'état stationnaire, qui prennent la forme d'échelle

$$\text{Pro}[s_k(t) = s_l(t)] - \sum r_a^2 \propto \frac{1}{L^{1/3}} \cos 2\pi \frac{k-l}{L} .$$

Perspectives

L'étude de la transition de phase hors d'équilibre du modèle *ABC* décrite dans cette partie est intéressante à plusieurs titres. Tout d'abord, elle constitue l'une des premières applications de la théorie macroscopique des fluctuations à l'étude d'un point critique. De plus, les résultats que nous avons obtenus sur les fluctuations de courant montrent que le modèle *ABC* fait partie des modèles exactement solubles présentant, comme les systèmes mécaniques traités dans la partie 2, une conduction anormale : il est donc possible que les méthodes que nous avons développées ici puissent contribuer à la compréhension de ces systèmes.

Pour caractériser la transition de phase du modèle, nous avons suivi une approche relativement courante, en séparant dans les équations les modes "lents" (peu amortis) des modes "rapides" (linéairement amortis) puis en intégrant sur ces derniers pour obtenir une équation d'évolution effective des modes lents. Il est très probable que cette approche se généralise à d'autres systèmes dans lesquels une transition de phase hors d'équilibre a été identifiée, par exemple dans le cas d'un système diffusif périodique conservant une quantité soumis à un forçage [2].

Les fluctuations de courant et les corrélations anormales que nous avons déduites de cette approche rappellent, de manière frappante, celles que nous avons mesurées numériquement pour des systèmes mécaniques (section 10.3). Cette ressemblance suggère les points suivants :

- il est possible qu'une hydrodynamique fluctuante, normale au niveau local, conduise à des fluctuations de courant anormales au niveau du système entier. Il est donc envisageable que, pour un système mécanique, les équations hydrodynamiques bruitées suffisent à expliquer l'anomalie ;
- la présence, dans le modèle *ABC*, de fluctuations de courant dont les cumulants croissent de plus en plus vite avec la taille L du système ($\langle Q_A^n(t) \rangle_c / t \propto L^{n-5/2}$) est associée à la présence, dans le système, de fluctuations sur une échelle de temps lente $t \propto L^{5/2}$. Dans le gaz de bâtons durs, les cumulants semblent se comporter de la même manière : il semble donc plausible que, là aussi, cet effet découle de l'existence de fluctuations lentes.
- si nous admettons l'existence de telles fluctuations lentes, nous pouvons envisager

d'écrire une équation d'évolution effective pour celles-ci. Contrairement au modèle ABC , pour lequel les variables lentes se résument à une amplitude complexe (celle du premier mode de Fourier de la densité de particules A), il semble probable que, dans un système mécanique, cette équation porte sur un continuum de variables.

Le modèle ABC lui-même présente plusieurs points d'ombre. Par exemple, lorsque la transition de phase est du premier ordre, la température de transition critique β_c n'est pas encore connue analytiquement.

Il est sans doute également possible d'étudier le comportement du modèle ABC au point critique dans d'autres géométries, en particulier dans un système ouvert (entre deux réservoirs) : en particulier, les fluctuations de courant pourraient à nouveau être comparées à celles de systèmes mécaniques, pour lesquels tous les cumulants du courant semblent décroître avec la même puissance de L dans le cas ouvert.

Conclusion et perspectives

Le développement de cette thèse s'est déroulé selon trois axes : l'étude de systèmes diffusifs sur la ligne infinie, celle de systèmes mécaniques dans plusieurs géométries, et enfin l'étude du modèle ABC sur un cercle. Dans chaque cas, nous avons pu obtenir des résultats nouveaux en nous intéressant aux fluctuations du courant, d'énergie ou de particules, présent dans chacun de ces modèles.

Pour parvenir à ces résultats, nous avons eu l'occasion de recourir à des méthodes analytiques et numériques variées. La partie I nous a permis de poursuivre, et de comparer, deux approches théoriques de natures très différentes : l'une, l'Ansatz de Bethe, procède d'une démarche microscopique et nous a amenés à traiter un mélange (parfois détonant) de combinatoire et d'analyse complexe ; l'autre, la théorie macroscopique des fluctuations (TMF), nous a conduits à considérer des problèmes d'optimisation continus souvent complexes.

Dans la partie II, l'essentiel de notre contribution a été de nature numérique, et a consisté à simuler, pour plusieurs systèmes dans des conditions aux bords variées, les fluctuations de courant d'énergie et les corrélations dans l'état stationnaire : à cette occasion, nous avons pu considérer plusieurs problèmes, tant théoriques (ergodicité du système, critère d'atteinte de l'état stationnaire) que pratiques (choix de l'algorithme de simulation, précision des mesures...). Enfin, dans la partie III, nous sommes revenus à des méthodes analytiques, et avons pu étudier comment la TMF se comporte au voisinage d'une transition de phase.

À quelques exceptions près, les résultats que nous avons obtenus se formulent simplement. Dans la partie I, nous avons montré que les fluctuations de courant vérifient plusieurs symétries : l'une, générale, provient d'une invariance par renversement du temps et prend la forme d'un théorème des fluctuations, tandis que l'autre, plus restreinte, s'interprète comme une invariance par rotation. Grâce à cette dernière symétrie, nous avons pu calculer exactement les fluctuations de courant dans un cas particulier (de manière microscopique), et observé qu'elles présentent dans ce cas une décroissance non gaussienne : nous avons ensuite généralisé cette décroissance à d'autres modèles (de manière macroscopique).

Dans la partie II, nous avons étudié les fluctuations de courant de trois modèles mécaniques (gaz de bâtons durs, gaz de disques durs sur tore fin, modèles d'Ianiri-Lebowitz) dans deux géométries différentes (segment entre deux réservoirs et cercle). Nous avons pu généraliser la loi de Fourier anormale suivie par ces modèles, connue pour

la moyenne du courant, à ses cumulants supérieurs : de plus, ces cumulants se comportent de manière différente selon la géométrie du système (ils semblent tous décroître de la même manière entre réservoirs, mais croître de plus en plus rapidement sur le cercle). Enfin, nous avons associé ces fluctuations anormales à la présence dans le système de corrélations à une échelle mésoscopique.

Dans la partie III, nous avons étudié le comportement d'un gaz sur réseau, le modèle *ABC*, qui a pour particularité de présenter une transition de phase hors d'équilibre. Nous avons étudié, à l'aide de la théorie macroscopique des fluctuations, le comportement des corrélations et des fluctuations de courant au voisinage de cette transition. Nous avons pu établir une théorie effective du point critique, qui nous a permis de montrer analytiquement que toutes deux se comportent alors de manière anormale ; de plus, il existe un point "tricritique" au niveau duquel les exposants des lois anormales sont modifiés.

Les perspectives de recherche auxquelles ces travaux pourraient mener sont détaillées, partie par partie, dans les chapitres 7, 12 et 19. D'un point de vue plus global, un problème central se dégage à l'issue de cette thèse : la compréhension théorique de la conduction anormale dans les systèmes mécaniques. Dans la partie II, nous avons étudié des caractéristiques nouvelles de ce phénomène ; dans la partie III, nous avons montré comment, pour un autre modèle, un comportement semblable se traduit en termes théoriques (apparition d'un régime sous-amorti dans des équations bruitées et émergence d'une échelle de temps lente). On peut espérer que cette "boîte à outils" soit à même de servir à la compréhension des systèmes mécaniques.

Bibliographie

- [1] T. Antal, P. L. Krapivsky, and A. Rákos. Logarithmic current fluctuations in nonequilibrium quantum spin chains. *Phys. Rev. E*, 78 :061115, 2008.
- [2] C. Appert-Rolland, B. Derrida, V. Lecomte, and F. van Wijland. Universal cumulants of the current in diffusive systems on a ring. *Phys. Rev. E*, 78(2) :021122, Aug 2008.
- [3] A. Ayyer, E. Carlen, J. L. Lebowitz, P. Mohanty, D. Mukamel, and E. R. Speer. Phase diagram of the ABC model on an interval. *J. Stat. Phys.*, 137 :1166, 2009.
- [4] J. Barton, J. L. Lebowitz, and E. R. Speer. The grand canonical ABC model : a reflection asymmetric mean-field Potts model. *J. Phys. A : Math. Theor.*, 44(6) :065005, 2011.
- [5] G. Basile, C. Bernardin, and S. Olla. Momentum conserving model with anomalous thermal conductivity in low dimensional systems. *Phys. Rev. Lett.*, 96(20) :204303, May 2006.
- [6] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Fluctuations in stationary nonequilibrium states of irreversible processes. *Phys. Rev. Lett.*, 87(4) :040601, Jul 2001.
- [7] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Macroscopic fluctuation theory for stationary non-equilibrium states. *J. Stat. Phys.*, 107(3) :635–675, May 2002.
- [8] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Current fluctuations in stochastic lattice gases. *Phys. Rev. Lett.*, 94(3) :030601, Jan 2005.
- [9] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Large deviation approach to non equilibrium processes in stochastic lattice gases. *Bulletin of the Brazilian Mathematical Society*, 37(4) :611–643, Dec 2006.
- [10] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Towards a nonequilibrium thermodynamics : A self-contained macroscopic description of driven diffusive systems. *J. Stat. Phys.*, 135 :857–872, 2009.

- [11] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Towards a nonequilibrium thermodynamics : A self-contained macroscopic description of driven diffusive systems. *J. Stat. Phys.*, 135(5) :857–872, Jun 2009.
- [12] L. Bertini, D. Gabrielli, and C. Landim. Strong asymmetric limit of the quasi-potential of the boundary driven weakly asymmetric exclusion process. *Comm. Math. Phys.*, 289 :311–334, 2009.
- [13] L. Bertini, D. Gabrielli, and J. Lebowitz. Large deviations for a stochastic model of heat flow. *J. Stat. Phys.*, 121 :843–885, 2005.
- [14] L. Bertini, A. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Non equilibrium current fluctuations in stochastic lattice gases. *J. Stat. Phys.*, 123(2) :237–276, Apr 2006.
- [15] L. Bertini, A. D. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Stochastic interacting particle systems out of equilibrium. *J. Stat. Mech : Theory Exp.*, (07) :P07014, 2007.
- [16] M. Bixon and R. Zwanzig. Boltzmann-Langevin equation and hydrodynamic fluctuations. *Phys. Rev.*, 187(1) :267–272, Nov 1969.
- [17] T. Bodineau and B. Derrida. Current fluctuations in nonequilibrium diffusive systems : an additivity principle. *Phys. Rev. Lett.*, 92(18) :180601, May 2004.
- [18] T. Bodineau and B. Derrida. Phase fluctuations in the ABC model. *preprint*, page submitted to J. Stat. Phys., 2011.
- [19] T. Bodineau, B. Derrida, V. Lecomte, and F. van Wijland. Long range correlations and phase transitions in non-equilibrium diffusive systems. *Journal of Statistical Physics*, 133 :1013–1031, 2008.
- [20] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and L. Rey-Bellet. Fourier’s law : a challenge to theorists. In *Mathematical physics 2000*, pages 128–150. Imp. Coll. Press, London, 2000.
- [21] E. Brunet, B. Derrida, and A. Gerschenfeld. Fluctuations of the heat flux of a one-dimensional hard particle gas. *EPL*, 90(2) :20004, 2010.
- [22] G. Casati and T. Prosen. Anomalous heat conduction in a one-dimensional ideal gas. *Phys. Rev. E*, 67(1) :015203, Jan 2003.
- [23] M. Clincy, B. Derrida, and M. R. Evans. Phase transition in the ABC model. *Phys. Rev. E*, 67(6) :066115, 2003.
- [24] O. Cohen and D. Mukamel. Phase diagram of the ABC model with nonequal densities. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 44 :415004, 2011.
- [25] G. E. Crooks. Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Phys. Rev. E*, 60 :2721–2726, 1999.

-
- [26] C. De Dominicis. A lagrangian version of halperin-hohenberg-ma models for the dynamics of critical phenomena. *Lett. Nuovo Cimento*, 12 :567–574, 1975.
- [27] J. de Gier and F. H. L. Essler. Bethe ansatz solution of the asymmetric exclusion process with open boundaries. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :240601, 2005.
- [28] J. de Gier and F. H. L. Essler. Exact spectral gaps of the asymmetric exclusion process with open boundaries. *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, 2006 :P12011, 2006.
- [29] L. Delfini, S. Lepri, R. Livi, and A. Politi. Anomalous kinetics and transport from 1D self-consistent mode-coupling theory. *J. Stat. Mech : Theory Exp.*, (02) :P02007, 2007.
- [30] B. Derrida. Non-equilibrium steady states : fluctuations and large deviations of the density and of the current. *J. Stat. Mech : Theory Exp.*, (07) :P07023, 2007.
- [31] B. Derrida and A. Gerschenfeld. Current fluctuations in one dimensional diffusive systems with a step initial density profile. *J. Stat. Phys.*, 137 :978–1000, 2009.
- [32] B. Derrida and A. Gerschenfeld. Current fluctuations of the one dimensional symmetric simple exclusion process with step initial condition. *J. Stat. Phys.*, 136 :1–15, 2009.
- [33] B. Derrida, J. Lebowitz, and E. Speer. Entropy of open lattice systems. *J. Stat. Phys.*, 126 :1083–1108, 2007.
- [34] B. Derrida and J. L. Lebowitz. Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :209–213, 1998.
- [35] J. M. Deutsch and O. Narayan. One-dimensional heat conductivity exponent from a random collision model. *Phys. Rev. E*, 68(1) :010201, Jul 2003.
- [36] A. Dhar. Heat conduction in a one-dimensional gas of elastically colliding particles of unequal masses. *Phys. Rev. Lett.*, 86(16) :3554–3557, Apr 2001.
- [37] A. Dhar. Heat transport in low-dimensional systems. *Adv. Phys.*, 57(5) :457–537, 2008.
- [38] A. Dhar and O. Narayan. Dhar et al. reply :. *Phys. Rev. Lett.*, 100(19) :199402, May 2008.
- [39] J. R. Dorfman, T. R. Kirkpatrick, and J. V. Sengers. Generic long-range correlations in molecular fluids. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 45 :213–239, 1994.
- [40] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morriss. Probability of second law violations in shearing steady states. *Phys. Rev. Lett.*, 71(21) :3616, Nov 1993.
- [41] D. J. Evans and D. J. Searles. The fluctuation theorem. *Adv. Phys.*, 51(7) :1529–1585, 2002.

- [42] M. R. Evans and T. Hanney. Nonequilibrium statistical mechanics of the zero-range process and related models. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 38 :R195, 2005.
- [43] M. R. Evans, Y. Kafri, H. M. Koduvely, and D. Mukamel. Phase separation and coarsening in one-dimensional driven diffusive systems : Local dynamics leading to long-range hamiltonians. *Phys. Rev. E*, 58(3) :2764–2778, 1998.
- [44] M. R. Evans, Y. Kafri, H. M. Koduvely, and D. Mukamel. Phase separation in one-dimensional driven diffusive systems. *Phys. Rev. Lett.*, 80(3) :425–429, 1998.
- [45] G. Fayolle and C. Furtlehner. Dynamical windings of random walks and exclusion models. part I : Thermodynamic limit in F^2 . *J. Stat. Phys.*, 114 :229–260, 2004.
- [46] G. Fayolle and C. Furtlehner. Stochastic deformations of sample paths of random walks and exclusion models. (*in Mathematics and computer science. III, Trends Math., Birkhäuser, Basel*), pages 415–428, 2004.
- [47] G. Fayolle and C. Furtlehner. Stochastic dynamics of discrete curves and multi-type exclusion processes. *J. Stat. Phys.*, 127 :1049–1094, 2007.
- [48] G. Gallavotti and E. Cohen. Dynamical ensembles in stationary states. *J. Stat. Phys.*, 80(5) :931–970, Sep 1995.
- [49] G. Gallavotti and E. G. D. Cohen. Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics. *Phys. Rev. Lett.*, 74(14) :2694–2697, Apr 1995.
- [50] P. L. Garrido, P. I. Hurtado, and B. Nadrowski. Simple one-dimensional model of heat conduction which obeys fourier’s law. *Phys. Rev. Lett.*, 86(24) :5486–5489, Jun 2001.
- [51] A. Gerschenfeld, B. Derrida, and J. L. Lebowitz. Anomalous Fourier’s law and long range correlations in a 1D non-momentum conserving mechanical model. *J. Stat. Phys.*, 141 :757–766, 2010.
- [52] C. Giardinà, J. Kurchan, and L. Peliti. Direct evaluation of large-deviation functions. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :120603, 2006.
- [53] O. Golinelli and K. Mallick. The asymmetric simple exclusion process : an integrable model for non-equilibrium statistical mechanics. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 39 :12679, 2006.
- [54] P. Grassberger, W. Nadler, and L. Yang. Heat conduction and entropy production in a one-dimensional hard-particle gas. *Phys. Rev. Lett.*, 89(18) :180601, Oct 2002.
- [55] L.-H. Gwa and H. Spohn. Bethe solution for the dynamical-scaling exponent of the noisy burgers equation. *Phys. Rev. A*, 46 :844–854, 1992.
- [56] R. J. Harris, A. Rakos, and G. M. Schutz. Current fluctuations in the zero-range process with open boundaries. *J. Stat. Mech : Theory Exp.*, (08) :P08003, 2005.

- [57] R. J. Harris, A. Rákos, and G. M. Schütz. Breakdown of gallavotti-cohen symmetry for stochastic dynamics. *EPL*, 75 :227, 2006.
- [58] R. J. Harris and G. M. Schutz. Fluctuation theorems for stochastic dynamics. *J. Stat. Mech : Theory Exp.*, (07) :P07020, 2007.
- [59] P. I. Hurtado. Breakdown of hydrodynamics in a simple one-dimensional fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :010601, 2006.
- [60] P. I. Hurtado and P. L. Garrido. Current fluctuations and statistics during a large deviation event in an exactly solvable transport model. *J. Stat. Mech : Theory Exp.*, (02) :P02032, 2009.
- [61] N. Ianiro and J. Lebowitz. Stationary nonequilibrium solutions of model boltzmann equation. *Found. Phys.*, 15 :531–544, 1985.
- [62] A. Imparato, V. Lecomte, and F. van Wijland. Equilibriumlike fluctuations in some boundary-driven open diffusive systems. *Phys. Rev. E*, 80(1) :011131, Jul 2009.
- [63] H.-K. Janssen. On a lagrangean for classical field dynamics and renormalization group calculations of dynamical critical properties. *Zeit. Phys. B*, 23 :377–380, 1976.
- [64] C. Jarzynski. Nonequilibrium equality for free energy differences. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :2690–2693, 1997.
- [65] K. Johansson. Shape fluctuations and random matrices. *Communications in Mathematical Physics*, 209 :437–476, 2000.
- [66] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :889–892, 1986.
- [67] C. Kipnis, C. Marchioro, and E. Presutti. Heat flow in an exactly solvable model. *J. Stat. Phys.*, 27(1) :65–74, Jan 1982.
- [68] L. Landau and E. Lifschitz. *Mécanique des fluides*. Éditions de Moscou, 1971.
- [69] V. Lecomte, A. Imparato, and F. van Wijland. Current fluctuations in systems with diffusive dynamics, in and out of equilibrium. *Prog. Theor. Phys. Supp.*, 184 :276–289, 2010.
- [70] A. Lederhändler, O. Cohen, and D. Mukamel. Phase diagram of the ABC model with nonconserving processes. *J. Stat. Mech.*, (11) :P11016, 2010.
- [71] A. Lederhändler and D. Mukamel. Long-range correlations and ensemble inequivalence in a generalized *abc* model. *Phys. Rev. Lett.*, 105(15) :150602, 2010.
- [72] E. Lee. Distribution of a particle’s position in the asep with the alternating initial condition. *Journal of Statistical Physics*, 140 :635–647, 2010.

- [73] H. Lee, L. S. Levitov, and A. Y. Yakovets. Universal statistics of transport in disordered conductors. *Phys. Rev. B*, 51(7) :4079–4083, Feb 1995.
- [74] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi. Heat conduction in chains of nonlinear oscillators. *Phys. Rev. Lett.*, 78(10) :1896–1899, Mar 1997.
- [75] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi. On the anomalous thermal conductivity of one-dimensional lattices. *EPL*, 43 :271, 1998.
- [76] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Phys. Rep.*, 377 :1–80(80), 2003.
- [77] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi. Universality of anomalous one-dimensional heat conductivity. *Phys. Rev. E*, 68(6) :067102, Dec 2003.
- [78] S. Lepri, C. Mejía-Monasterio, and A. Politi. A stochastic model of anomalous heat transport : analytical solution of the steady state. *J. Phys. A : Math. Theor.*, 42 :025001, 2009.
- [79] B. Li and J. Wang. Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in one-dimensional systems. *Phys. Rev. Lett.*, 91(4) :044301, Jul 2003.
- [80] T. M. Liggett. *Interacting Particle Systems*. Number 276 in Grundle Math. Wissen. Springer-Verlag, 1985.
- [81] T. M. Liggett. *Stochastic Interacting Systems : Contact, Voter and Exclusion Processes*. Springer, 1999.
- [82] J. Lukkarinen and H. Spohn. Anomalous energy transport in the FPU- β chain. *Comm. Pure Appl. Math.*, 61(12) :1753–1786, 2008.
- [83] C. Maes. The fluctuation theorem as a gibbs property. *J. Stat. Phys.*, 95(1) :367–392, Apr 1999.
- [84] T. Mai, A. Dhar, and O. Narayan. Equilibration and universal heat conduction in Fermi-Pasta-Ulam chains. *Phys. Rev. Lett.*, 98(18) :184301, May 2007.
- [85] P. C. Martin, E. D. Siggia, and H. A. Rose. Statistical dynamics of classical systems. *Phys. Rev. A*, 8 :423–437, 1973.
- [86] O. Narayan and S. Ramaswamy. Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems. *Phys. Rev. Lett.*, 89(20) :200601, Oct 2002.
- [87] J. M. Ortiz de Zárate and J. V. Sengers. On the physical origin of long-ranged fluctuations in fluids in thermal nonequilibrium states. *J. Stat. Phys.*, 115 :1341–1359, 2004.
- [88] A. Pereverzev. Fermi-Pasta-Ulam β lattice : Peierls equation and anomalous heat conductivity. *Phys. Rev. E*, 68(5) :056124, Nov 2003.

- [89] S. Prolhac and K. Mallick. Current fluctuations in the exclusion process and bethe ansatz. *J. Phys. A : Math. Theor.*, 41 :175002, 2008.
- [90] T. c. v. Prosen. Open xxz spin chain : Nonequilibrium steady state and a strict bound on ballistic transport. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :217206, 2011.
- [91] A. Rákos and G. Schütz. Current distribution and random matrix ensembles for an integrable asymmetric fragmentation process. *J. Stat. Phys.*, 118 :511–530, 2005.
- [92] T. Sasamoto. Fluctuations of the one-dimensional asymmetric exclusion process using random matrix techniques. *J. Stat. Mech. : Theo. Exp.*, 2007 :P07007, 2007.
- [93] T. Sasamoto and H. Spohn. The crossover regime for the weakly asymmetric simple exclusion process. *Journal of Statistical Physics*, 140 :209–231, 2010.
- [94] A. V. Savin, G. P. Tsironis, and A. V. Zolotaryuk. Heat conduction in one-dimensional systems with hard-point interparticle interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 88(15) :154301, Mar 2002.
- [95] R. Schmitz and E. G. D. Cohen. Fluctuations in a fluid under a stationary heat flux. i. general theory. *J. Stat. Phys.*, 39 :285–316, 1985.
- [96] S. Sethuraman and S. R. S. Varadhan. Large deviations for the current and tagged particle in 1D nearest-neighbor symmetric simple exclusion. *ArXiv :1101.1479*, 2011.
- [97] H. Spohn. Long range correlations for stochastic lattice gases in a non-equilibrium steady state. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 16 :4275, 1983.
- [98] H. Spohn. The phonon Boltzmann equation, properties and link to weakly anharmonic lattice dynamics. *J. Stat. Phys.*, 124 :1041–1104, 2006.
- [99] J. Tailleur, J. Kurchan, and V. Lecomte. Mapping out-of-equilibrium into equilibrium in one-dimensional transport models. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 41 :505001, 2008.
- [100] C. Tracy and H. Widom. A fredholm determinant representation in asep. *Journal of Statistical Physics*, 132 :291–300, 2008.
- [101] C. A. Tracy and H. Widom. Integral formulas for the asymmetric simple exclusion process. *Communications in Mathematical Physics*, 279 :815, 2008.
- [102] H. van Beijeren. Exact results for anomalous transport in one dimensional Hamiltonian systems. *ArXiv :1106.3298*, 2011.
- [103] Wang, Lei and Wang, Ting. Power-law divergent heat conductivity in one-dimensional momentum-conserving nonlinear lattices. *EPL*, 93 :54002, 2011.

Résumé

Les systèmes hors d'équilibre sont souvent caractérisés par la présence d'un courant, d'énergie ou de particules, qui brise le bilan détaillé. Dans ces systèmes, les outils traditionnels de la physique statistique, telles la fonction de partition ou l'énergie libre, ne sont pas définies. De nouvelles méthodes, issues de la théorie des systèmes dynamiques, ont été introduites au cours des vingt dernières années afin de décrire ces systèmes à partir de leurs propriétés macroscopiques : elles viennent s'ajouter aux méthodes microscopiques disponibles dans certains cas, comme les systèmes intégrables.

Nous nous sommes intéressés au courant Q_t traversant un tel système pendant une durée t . Q_t étant une grandeur fluctuante, nous avons cherché à obtenir sa statistique (fonction de grandes déviations, cumulants). Dans la première classe de systèmes que nous avons étudiée, les systèmes diffusifs conservant une quantité sur la ligne infinie, nous avons pu calculer ces cumulants exactement ; nous avons aussi pu confronter les résultats des approches microscopiques et macroscopiques. Notre intérêt s'est ensuite porté sur une seconde classe de systèmes, les systèmes mécaniques, qui présentent un écart à la loi de Fourier en dimension 1 : numériquement, nous avons pu généraliser cette propriété aux cumulants supérieurs de Q_t . Enfin, nous avons étudié les fluctuations du courant d'un système, le modèle ABC , présentant une transition de phase hors d'équilibre. Les fluctuations, qui respectent la loi de Fourier loin de la transition, deviennent anormales près du point critique, leur comportement se rapprochant alors qualitativement de celui observé dans les systèmes mécaniques.

Mots-clefs : hors d'équilibre, courant, loi de Fourier, transitions de phase

Abstract

Out-of-equilibrium systems are often associated with the presence of a current, of energy or of particles, which breaks detailed balance. In these systems, the usual tools of statistical mechanics, such as the free energy, are unavailable. New methods, inspired by the theory of dynamical systems, can describe these models from their macroscopic properties : they are joined by the microscopic methods available in some specific cases, such as integrable systems.

We studied the current Q_t which crosses such systems during the time t . Since Q_t is a random variable, we have considered its full counting statistics, through its large deviation function or its cumulants. In the first class of systems we studied, diffusive systems with one conserved quantity on the infinite line, we were able to compute the latter exactly; we also compared the predictions of macroscopic and microscopic approaches in this case. We then studied one-dimensional mechanical models, which are known to exhibit a departure from Fourier's law in one dimension : we were able to determine numerically that this anomalous behavior extends to the higher cumulants of Q_t . Finally, we studied a system, the ABC model, which exhibits an out-of-equilibrium phase transition. Away from the transition, current fluctuations obey Fourier's law; however, they become anomalous close to the critical point, with a behavior reminiscent of mechanical models.

Keywords: out of equilibrium, current, Fourier's law, phase transitions